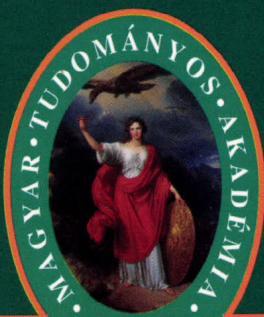


AKADÉMIAI MŰHELY

# SZÉKFOGLALÓK

1995–1998



1825







SZÉKFOGLALÓK  
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIAÁN  
1995–1998  
II. kötet



AKADÉMIAI MŰHELY  
Székfoglalók a Magyar Tudományos Akadémián

SZERKESZTŐBIZOTTSÁG  
Beck Mihály, Glatz Ferenc (elnök), Hámori József, Ritoók Zsigmond



# SZÉKFOGLALÓK 1995-1998

II. kötet

MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST • 1999



Szerkesztő  
GLATZ FERENC

Olvasószerkesztő  
Pótó János

ISBN 963 508 145 6 ö  
ISBN 963 508 147 2

Kiadja  
a Magyar Tudományos Akadémia  
Felelős kiadó: Szabó B. István  
Kiadói szerkesztő: Burucs Kornélia  
Nyomdai előkészítés: MTA Történettudományi Intézete kiadványcsoportja  
Tördelő: Csányi Attila  
Nyomdai munkálatok: Dabas Jegyzet Kft.  
Felelős vezető: Marosi György ügyvezető igazgató  
Készült 44,7 A/5 ív terjedelemben 800 példányban

# Tartalom

## VII. KÉMIAI TUDOMÁNYOK OSZTÁLYA

- BARTÓK Mihály: Térkémi tényezők szerepe a fémkatalízisben  
GÖRÖG Sándor: A gyógyszer-analitika szépségei  
KÁLMÁN Alajos: Barangolások kristályrácsokban  
PÁLINKÁS Gábor: Molekuláris oldatkémia  
SZABADVÁRY Ferenc: Magyar tudománytörténeti tabló, előtérben a kémia  
LIPTÁK András: Fehérje-szénhidrát kölcsönhatások  
TŐKE László: Szupramolekuláris kémia; koronaéterek  
FARKAS Tibor: Membránfoszfolipidek molekuláris összetétele és a testhőmérséklet

## VIII. BIOLÓGIAI TUDOMÁNYOK OSZTÁLYA

- VENETIANER Pál: A génsebész műszerei: a restrikciós-modifikációs enzimek  
TEPLÁN István: Antitumor aktivitású peptidek  
FREUND Tamás: Agykérgi neuronhálózatok szerkezete és működése

## IX. GAZDASÁG- ÉS JOGTUDOMÁNYOK OSZTÁLYA

- SAJÓ András: A jogosultságok lehetősége  
PALÁNKAI Tibor: Az integráció mérésének néhány elméleti-stratégiai kérdése  
VÉKÁS Lajos: A szerződési szabadság alkotmányos korlátai  
RÉZLER Gyula: Az arbitráls szociológiája  
FERGE Zsuzsa: A civilizációs folyamat fenyegetettsége

## X. FÖLDTUDOMÁNYOK OSZTÁLYA

- MAROSI Sándor: A földrajzi táj kutatások összetettsége és alkalmazhatósága  
MESKÓ Attila: Környezettudomány, környezeti geofizika  
BÁRDOSSY György: A radioaktív hulladék hazai elhelyezésének földtudományi alapjai

## XI. FIZIKAI TUDOMÁNYOK OSZTÁLYA

- ZIMÁNYI József: A maganyagtól a kvarkanyagig a nehézion-fizikában  
VICSEK Tamás: A természet geometriája





**VII. KÉMIAI TUDOMÁNYOK**  
**OSZTÁLYA**



Bartók Mihály

az MTA rendes tagja

# TÉRKÉMIAI TÉNYEZŐK SZEREPE A FÉMKATALÍZISBEN

Elhangzott 1995. december 12-én

A heterogén katalízisben a térkémiiai tényezők szerepéről szólni a katalizátorból és a reaktánsokból álló rendszerben lejátszódó események vonatkozó taglalását jelenti. A heterogén katalízis sztereokémiája témaköréhez tartozó alábbi kérdésekről lehet szó: szubsztituensek szterikus hatása, szterikus gátítások, szubsztituensek ún. horgonyzó hatása, geometriai izomerek képződése és átalakulása, optikai izomerek képződése és átalakulása, a reaktánsok konformációjának hatása, a katalizátorfelület geometriájának és módosításának jellemzése és hatása, aktív helyek jellemzése és szerepe, átmeneti állapotok sztereokémiai jellemzése és hatása és mindezek miként jelennek meg az érintett vegyületek átalakulásának sebességében és szelektivitásában, beleértve természetesen a sztereo- és enantioszelektivitásokat is.

A térkémiiai tényezők szerepét kísérletileg egyértelműen igazolni olyan vegyülettípusoknál lehet, amelyek – adott körülmények között – adott konformációval rendelkeznek (ilyenek lehetnek egyes gyűrűs vegyületek), s a tanulmányozott reakcióhoz képest a konfigurációs-konformációs változások kisebb sebességgel mennek végbe. Mint a kémiai problémakörök általában, e témakör is sokváltozós, bonyolult feladatot jelent.

Ebből a nagy halmazból – ami a katalizátorokat, a reaktánsokat és a különböző reakciókat illeti – egy igen szűk területet választottam ki, különböző reaktán-



sok, hidrogén jelenlétében, fémkatalizátorokon lejátszódó néhány reakciójánál tapasztalt térkémi jelenségeket. A megközelítés így természetesen szerves kémiai jellegű. Nem csökkentve értelemszerűen ezzel egyéb reakciók jelentőségét, valamint a katalizátorra mint *szilárd testre vonatkozó, döntően fontos geometriai tényezők szerepét* (egyébként hordozón lévő fémekkel, módosított fémekkel, amorf fémötvözetekkel és fémeket tartalmazó grafit interkalációs rétegvegyületekkel végeztük a vizsgálatokat).

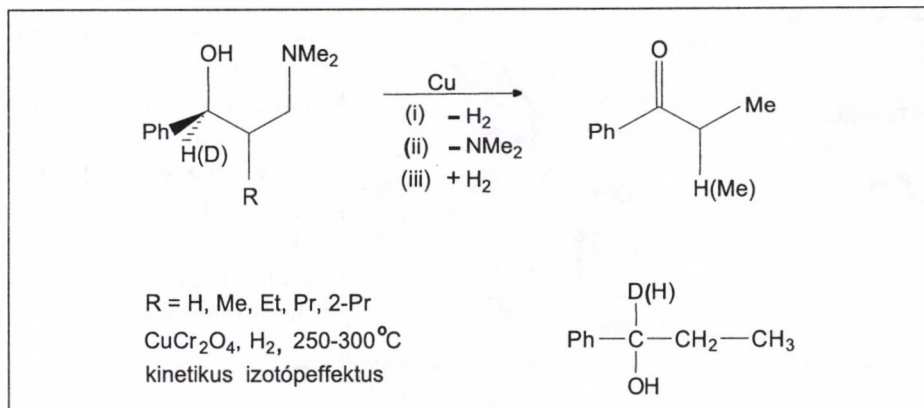
A témakört érintő általános bevezető után olyan példákat szeretnék bemutatni, amelyekkel *érzékelteni* lehet az ezen a téren folyó kutatások mai helyzetét. A példákat túlnyomórészt saját kutatási eredményeinkből választottam, kiegészítve néhány jellemző, a szakirodalomból választott reakcióval (az utóbbiakat az ábrákon megjelöltem). Az általunk vizsgált modellvegyületek köre: *cikloalkánok, olefinek, alkoholok, diolok, aminoalkoholok, gyűrűséterek, dioxacikloalkánok, oxazacikloalkánok, szilacikloalkánok, egyes bifunkciós vegyületek* (a példákat a kurzivált vegyülettípusokból választottam).

A heterogén katalitikus szerves kémiai reakciók többségénél vagy *elektrofil jellegű (tehát savas), vagy fémkatalizátorokat* használnak. Az *elektrofil heterogén katalitikus reakciók sztereokémiája, mechanizmusa* megfelelően jól értelmezhető a homogén sav katalizálta folyamatok ismert törvényszerűségei alapján. A savkatalízisben szereplő katalitikusan aktív centrumok ugyanis jobban definiáltak, mint a fémkatalizátorok aktív helyei. Igaz ugyan, hogy mind a Broensted-, mind a Lewis-centrumok savi erősségében nagy különbségek vannak, a tapasztalatok mégis az előbbieket támasztják alá. A fémkatalitikus reakciók értelmezésének alapvető problémáját az aktív centrumok sokfélesége, valamint egy-egy reakció lejátszódásáért felelős aktív helyek milyenségének meghatározása okozza. Ezek a gondok számos nehézséget jelentenek a fémkatalitikus reakciók előrejelzésére.

## Szubsztituensek térgátló hatása

A szubsztituensek térgátló hatására három példát mutatok be a *dehidrogéneződés, a hidrogénátvitel és az izomerizáció* területéről.

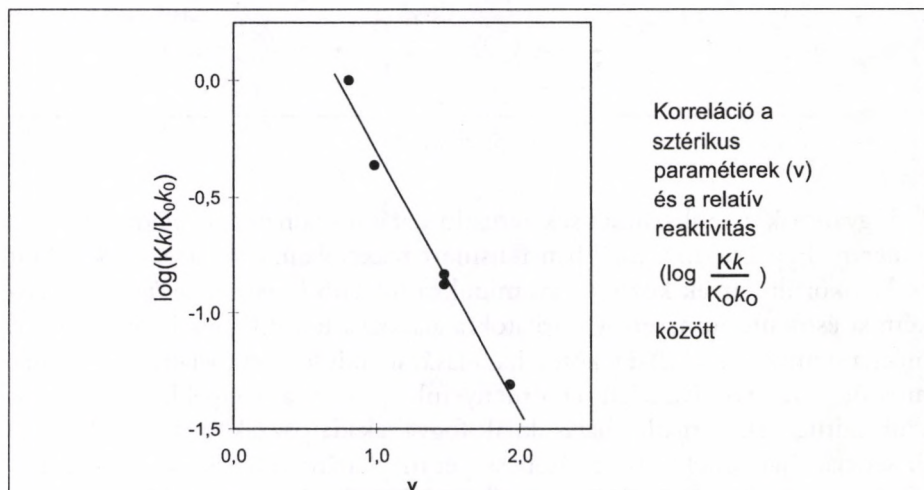
Lebegyev alkotta meg tapasztalati szabályát, amely szerint a szubsztituensek méretének növelése csökkenti az olefinkötés hidrogénezésének sebességét, ami a szubsztituensek térgátló hatására vezethető vissza. Kísérleteink igazolták ennek érvényességét egy általunk korábban felismert reakcióban, a Mannich-kondenzációval egyszerűen előállítható 1,3-aminoalkoholok ketonokká történő átalakítása során. Ugyanis az 1. ábrán vázolt kísérletek eredményei igazolták, hogy a fenildeuteropropanollal végzett dehidrogénezési kísérletek mini-



1. ábra

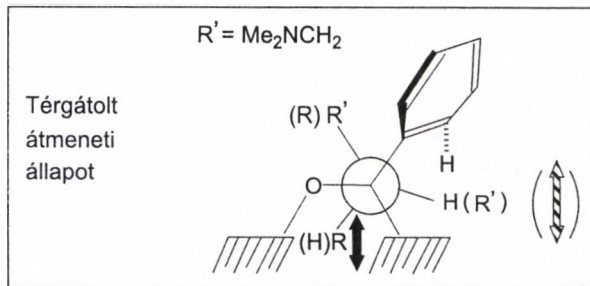
mális izotópeffektust mutattak, sebességhatározó lépés az oxigénen történő adszorpció, a dehidrogénezés sebessége csökken a reakciócentrumhoz kötődő szubsztituensek méretének növelésével, a szubsztituensek térkitöltését jellemző Charton-sztérikus konstansok és a relatív átalakulási sebességek között lineáris korreláció van (2. ábra). Tehát a *sztérikus tasztítás* (3. ábra) meghatározza az alkoholok dehidrogénezési sebességét.

A 2-szubsztituált 1,3-propándiolok rézkatalizátorokon lejátszódó átalakulásának vizsgálatával igazoltuk, hogy az 1,3-diol  $\rightarrow$  oxovegyület átalakulásban kulcsszerepet játszó *hidrogénátviteli folyamatok* végbemenetelét a szubsztituen-



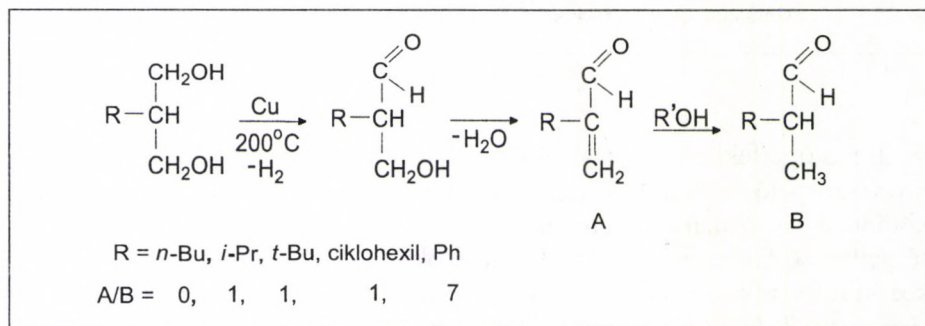
2. ábra



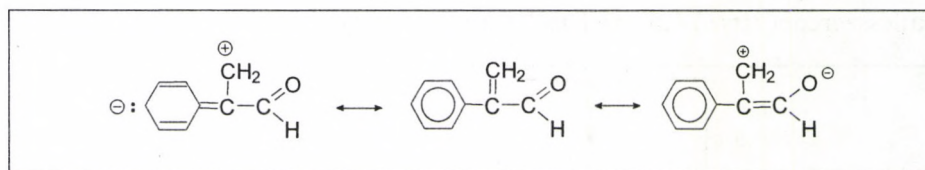


3. ábra

sek szterikus és elektronikus tulajdonságaik révén lényegesen befolyásolják (4. ábra). Fenilcsoport esetén elektronsift és mezomer hatások fellépte akadályozza a térgátolt olefinkötés hidrogéneződését (5. ábra).

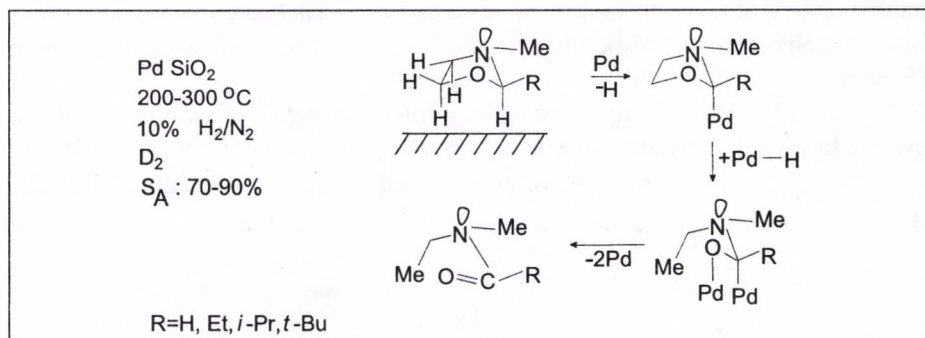


4. ábra



5. ábra

Ugyancsak a szubsztituensek térgátoló hatására vonatkozó példa látható a 6. ábrán. Egy általunk korábban felismert reakcióban, az oxazolidinek vázolt reakciókörülmények közötti, savamidokká történő izomerizációjában sztereokémiai és deutériumcsere-vizsgálatokra alapozva tettünk javaslatot a reakció mechanizmusára. C(2)-H kötés hasadásával induló disszociatív mechanizmusról van szó. Kísérleti eredményeink szerint a nagyobb térkitöltésű szubsztituensek térgátoló hatásuknál fogva akadályozzák a C(2)-H kötés disszociációját, amely a reakciósebességet meghatározó lépés. A fenti mechanizmust igazolják: a szubsztituensek induktív hatásának és térkitöltésének befolyásoló szerepe, reakciósebességi-, H-D-csere és a felületi hidrogénborí-

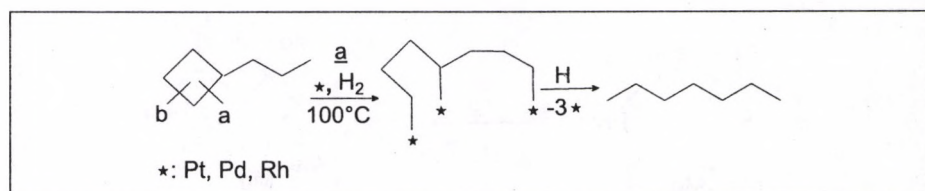


6. ábra

tottságra vonatkozó mérések. Ismert összefüggés szerint, merev szerkezetű azacikloalkánok esetén a nitrogén kötetlen elektrópárja axiális orientáltságú, és a molekula ezzel ellentétes oldalról kötődik a felülethez.

## Szubsztituensek horgonyzó hatása

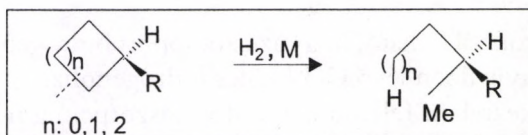
A következőkben két példát mutatok be a reakcióban közvetlenül részt nem vevő csoportok horgonyzó hatásának igazolására. A cikloalkánok *hidrogenatív gyűrűfelnylásának* tanulmányozása során, *propilciklobután* esetén (7. ábra) az



7. ábra

alkilcsoport szokatlan, ún. horgonyzó hatását tapasztaltuk. Az oldalcsoporthorgonyzó hatása megváltoztatja a gyűrűnyitás szelektivitását. A propilcsoport az *a* irányú hasadás számára

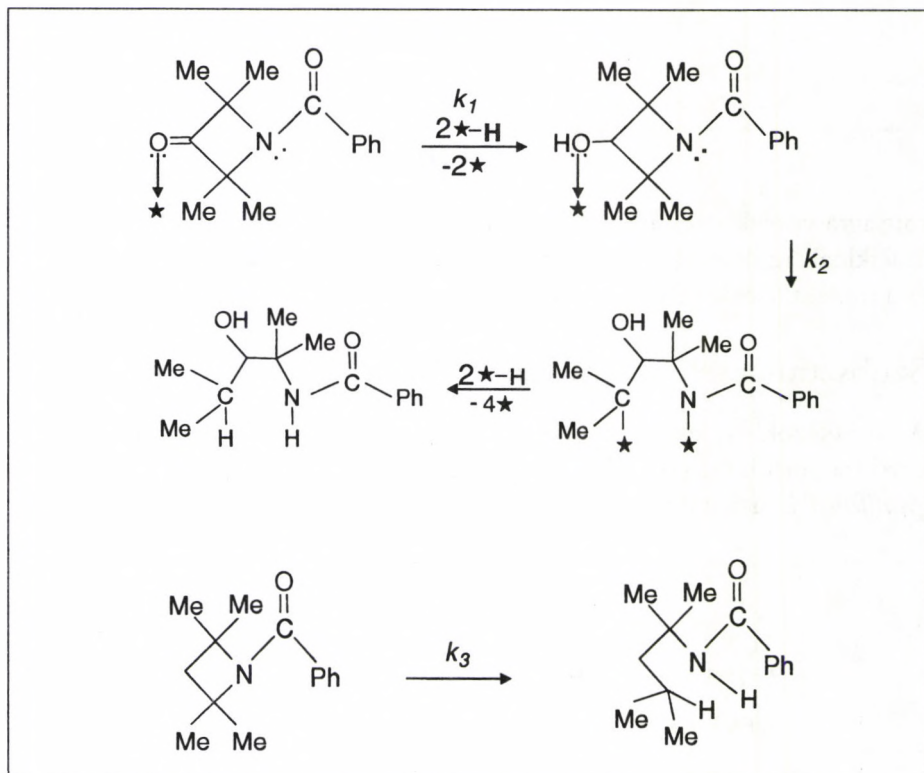
kedvező helyzetben rögzíti a molekulát. 3- és 5-tagú cikloalkánok esetén – kísérletileg eddig nem igazolt okoknál fogva – a jelenség nem észlelhető. Az alkilcikloalkánok hidrogenolízisének szelektivitására vonatkozóan a szakiro-



8. ábra

dalom egységesen az alkilcsoportok térgátló hatásának szerepét emeli ki, azaz a hidrogenolízisnél a kevésbé térgátolt C–C kötésnél történik a hidrogenolízis (8. ábra).

Egy másik példa a szubsztituált azetidín-vázak *vegyületek hidrogenolízisének* észlelt horgonyzó hatást mutatja be (9. ábra). A hármas helyzetű hidroxilcsoport a C–N kötés hidrogenolízisének sebességét növeli. A kísérleti ada-



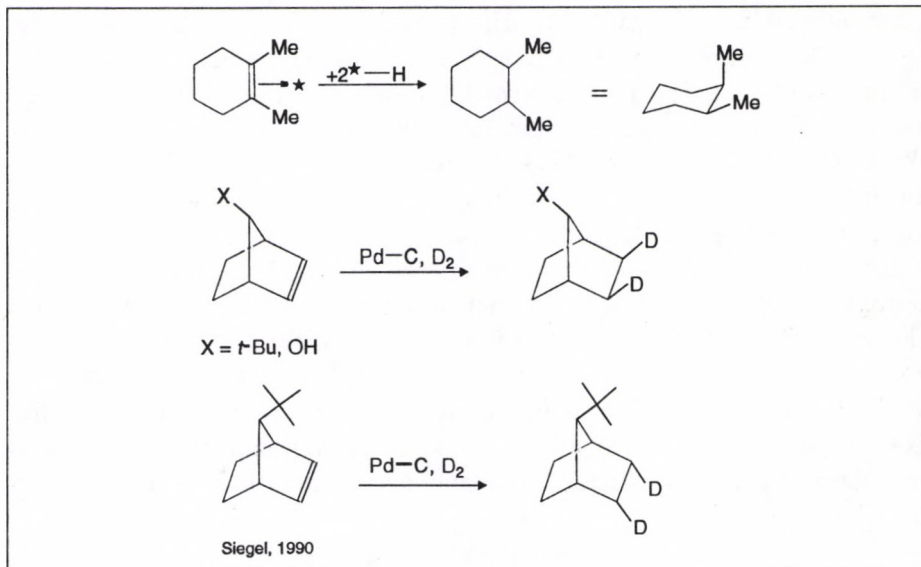
9. ábra

tokból látható, hogy az oxocsoport hidrogéneződése gyorsabb, mint a feszült gyűrűben lévő C–N kötés hidrogenolízise. A kötetlen elektronpárok következtében fellépő kétpontos adszorpció a négytagú gyűrűt planáris konformációban a katalizátor felületén rögzíti. Ezáltal a benzoilcsoport távol kerül a felülettől, és nem történik meg sem az N–CO kötés hidrogenolízise, sem a fenilcsoport perhidrogéneződése. Hasonló kísérleti körülmények között jelentősen kisebb sebességgel megy végbe az oxo- vagy a hidroxilcsoport nélküli molekula hidrogenolízise.

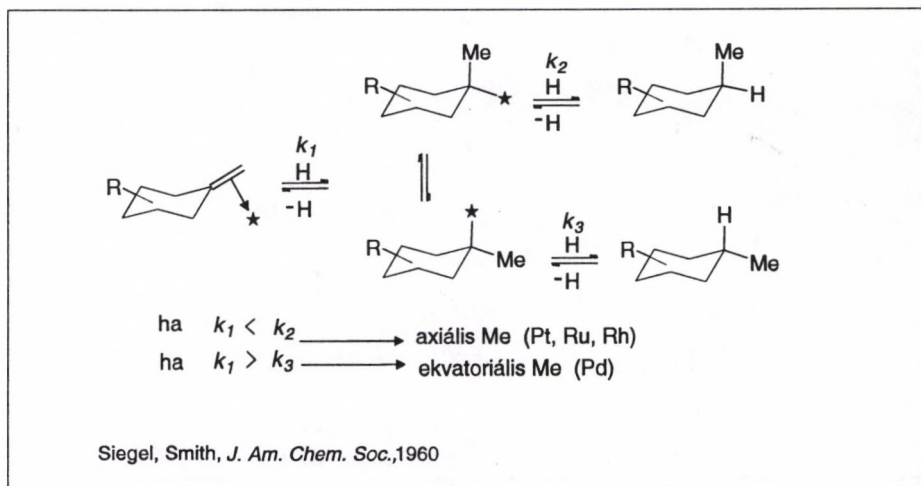


## Kettős kötésű vegyületek hidrogénezése

A következő néhány példa a kettős kötés hidrogén-addíciójának és izomerizációjának sztereokémiai jellegzetességeiről informál. Az általános törvényszerűség a hidrogénatomok bekötődésének *cisz*-addíciójáról szól (10. ábra). Vannak azonban e



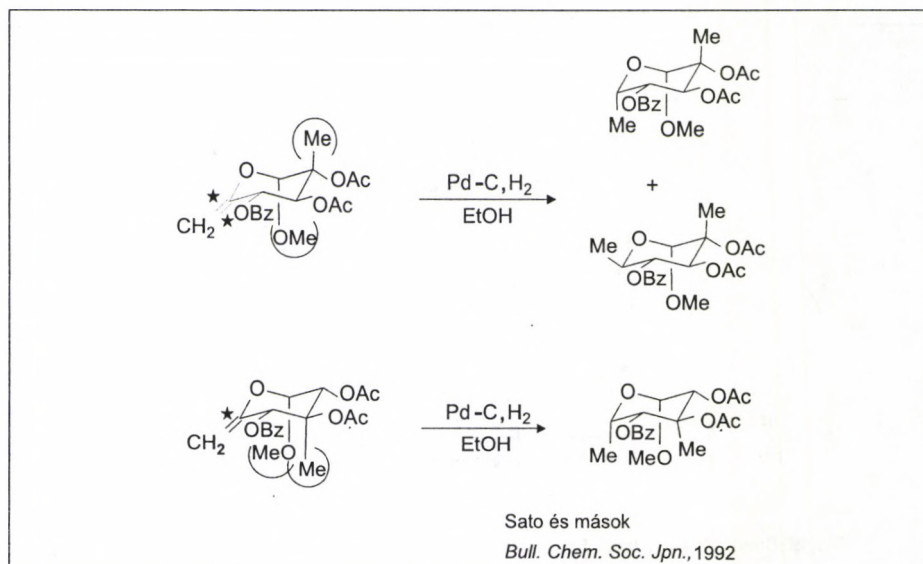
10. ábra



11. ábra

téren is nehezen definiálható kivételek. A hidrogénezés sztereokémiáját a Horiuti–Polányi-mechanizmus alapján jól lehet értelmezni (négy elemi lépés). Hogy a reakció során melyik sztereoizomer keletkezik, az attól függ, hogy melyik a termékmeghatározó elemi reakció (11. ábra). Ha a termékmeghatározó lépés a reaktáns adszorpciója vagy az adszorbeált reaktánshoz az első H-atom kapcsolódása, akkor a reakció sztereokémiáját a reaktáns és a katalizátor közötti kölcsönhatás kontrollálja (azaz, ha  $k_1 < k_2$ , axiális Me csoport alakul ki). Ha a termékmeghatározó lépés a második hidrogénatom bekötődése az ún. félhidrogénezett felületi termékhez, akkor a sztereokémiát a két félhidrogénezett felületi epimer relatív stabilitása határozza meg (azaz, ha  $k_1 > k_3$ , ekvatoriális Me alakul ki exociklusos olefinek esetén). Hogy melyik a termékmeghatározó lépés, az sok tényezőtől függ: fémtől, a szubsztituensek helyzetétől, méretétől, a reakció körülményeitől.

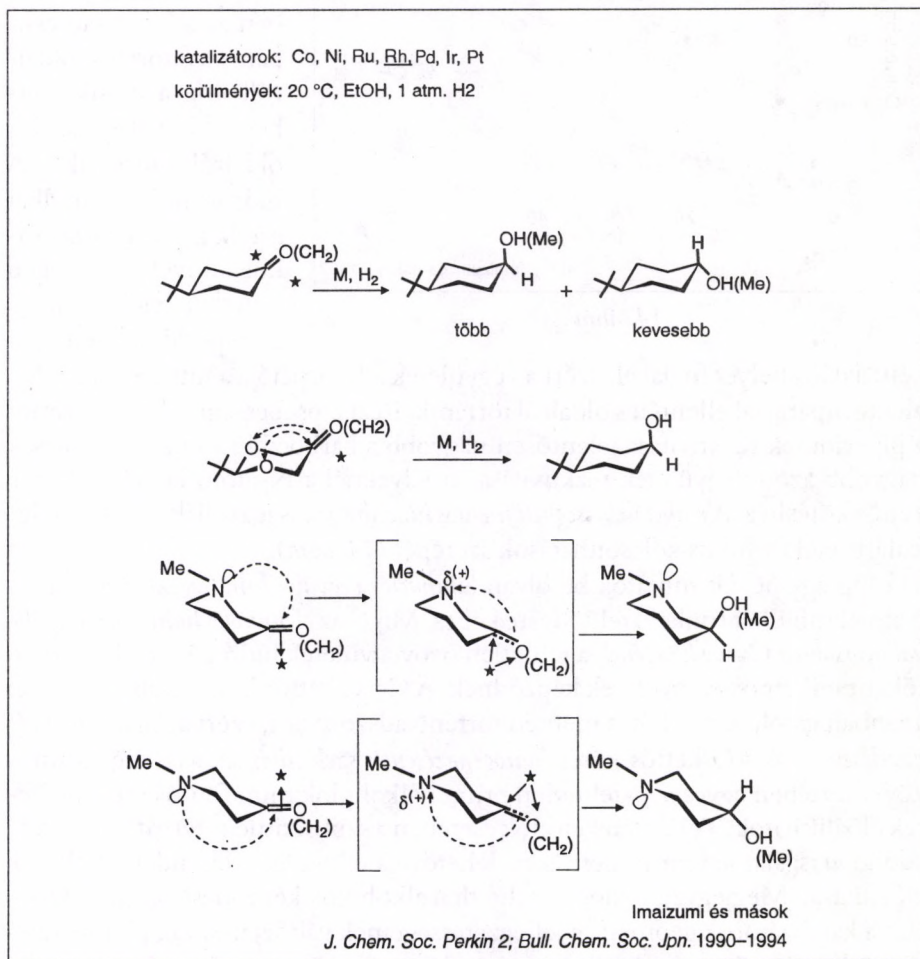
Exociklusos olefinek esetén a hidrogénezés sztereokémiáját az exociklusos kettős kötés adszorpciójának két elvi lehetősége közül (axiális vagy ekvatoriális oldalról történő adszorpció) a térkémiailag kedvezőbb határozza meg, azaz, hogy a gyűrű melyik oldalán helyezkedik el kevesebb szubsztituens. A Me-6-dezoxi- $\alpha$ -D-hex-5-eno-piranozidok hidrogéneződésénél jól látható az axiális szubsztituensek térgátlásának a termékeloszlásra gyakorolt hatása. Az alsó vegyületnél csupán az ekvatoriális irányból történő támadás a megengedett (12. ábra).



12. ábra

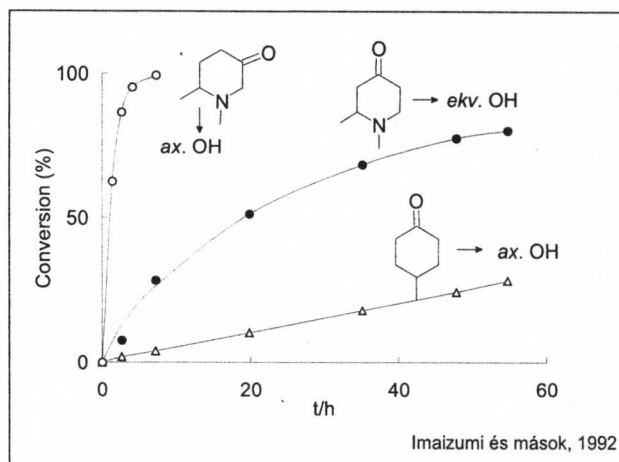


A heteroatomot (O, N) tartalmazó exociklusos  $\sigma\pi$ -kötésű vegyületek (olefinek és ketonok) hidrogénezésének termékeloszlására nemcsak a térkémi tényezőknek, hanem a reaktáns kettős kötése  $\pi$ -elektronjainak és a heteroatom kötetlen elektronpárjai *intramolekuláris kölcsönhatásának* is meghatározó szerepe van (13. ábra). A vizsgálatok többségét ródium katalizátoron végezték. *Ciklo-*



13. ábra

*hexánváz*as vegyületek esetén mindkét irányú adszorpció megengedett, azzal a kiegészítéssel, hogy az ekvatoriális *terc*-butil-csoport némileg akadályozza az axiális irányú adszorpciót. *Dioxánváz*as vegyületek esetén sztereospecifikus a hidrogénezés. A hidrogénbekötődés csak az ekvatoriális oldalról megengedett.



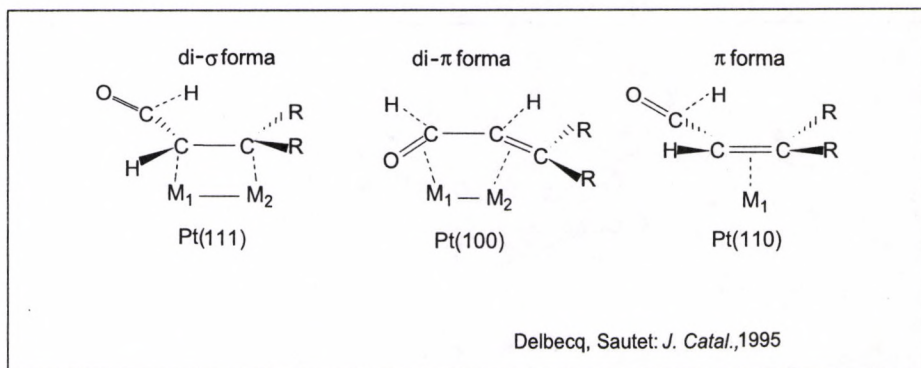
14. ábra

ként axiális helyet foglal el, ezért a vegyületek adszorpciója a nitrogén kötetlen elektronpárjával ellentétes oldalról történik. Reakciósebességi mérések szerint a piperidinek reaktivitása jelentősen nagyobb a karbociklusoknál. Ugyancsak nagyobb azon vegyületek reaktivitása, amelyeknél a N-atom közelebb van a kettős kötéshez. A reakciósebességbeli jelentős különbségek is igazolják az intramolekuláris elektronikus kölcsönhatások szerepét (14. ábra).

Még egy példát mutatok be olyan *bifunkciós vegyületek hidrogénezésére*, amelyeknél mindkét funkció telítődésre képes. Mivel az *olefinkötés hidrogénezése sokkal gyorsabb a C=O kötésénél*, a telítetlen oxovegyületek hidrogéneződése során főként telített oxovegyületek képződnek. A C=C kettős kötés szubsztituensei azonban gátolják az e kötés mentén történő adszorpciót, ezért a *szubsztituáltság növelésével a C=O kettős kötés hidrogénezésének szelektivitása növelhető*, aminek következtében egyes  $\alpha, \beta$ -telítetlen primer alkoholok mint fontos intermedierek előállíthatók. Telítetlen ketonok esetében a szubsztituens térgátló hatása az eddigi vizsgálatok szerint nem teszi lehetővé a telítetlen szekunder alkoholok előállítását. Megjegyzem, hogy a telítetlen alkoholok képződésének szelektivitása a katalizátorok geometriai jellegzetességeinek változtatásával, pl. megfelelő pórusméretű zeolitok alkalmazásával növelhető, ugyanis csak a láncvégi formilcsoport férhet a hidrogénező aktív helyhez, a szubsztituált olefinkötés nem. A zeolitok alkalmazása mellett igen változatos törekvések vannak a hordozós fémkatalizátorok felületének módosítására, olyan geometriai és energetikai összhang megteremtésére a katalizátor felülete és a reaktáns között, amely az olefinkötés hidrogénezésének gátlásával, másrészt a C=O kötés polarizációjának növelésével segíti elő a C=O kötés hidrogénezését. Telítetlen aldehi-

Ehhez hasonló a helyzet a *piperidinvázas vegyületek hidrogénezése* esetén. Az ábrán látható módon egyik esetben az adszorpció csupán ekvatoriális oldalról, míg a másik esetben kizárólag axiális oldalról történik. A hidrogénezés mindkét esetben szterspecifikus, mivel a nitrogén kötetlen elektronpárja a piperidinekben fő-



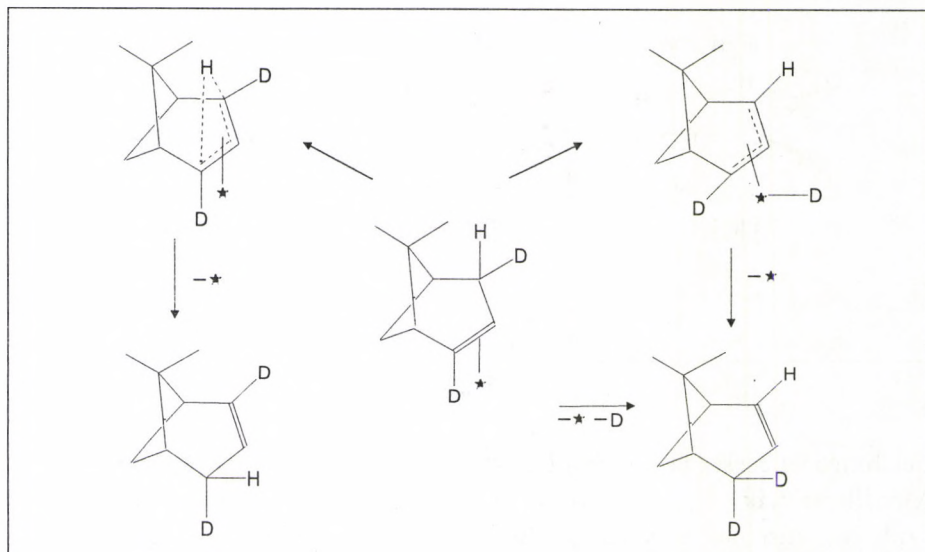


15. ábra

dek hidrogénezését a közelmúltban vizsgálták *egy kristály-felületeken* is (15. ábra). Megállapították, hogy mind az egy kristály típusától, mind a reaktáns szubsztituenseinek helyzetétől függően az adszorpció geometriája különbözik. Ezek jó példák a *reaktáns és a katalizátorfelület közötti geometriai összhang* tekintetében.

## Olefinok izomerizációja

Az *olefinok hidroizomerizációja* sztereokémiai lefutásának tanulmányozására alkalmas molekula az *apopinén*. Ez a molekula csak az egyik oldalával képes a felülethez kötődni. Ugyanis az áthidaló szénatom és a hozzákapcsolódó két metilcsoport sztérikusan gátolja az ezen az oldalon történő adszorpciót. Az izomerizáció mellett végbemehet a kettős kötés telítődése is. A hidrogéneződés a telített termék GC analízisével, míg az izomerizáció az optikai forgatóképesség változásának polariméteres mérésével követhető. Egyébként az *izomerizáció palládiumon jelentősen gyorsabb az addíciónál*. Az olefinizomerizáció és -addíció elfogadott mechanizmusa a klasszikus Horiuti–Polányi-mechanizmus. Eszerint deutérium atmoszférában a termékben allil-helyzetű D-nak kell beépülnie. Apopinén esetében azonban nem ez történt, hiszen az izomerizáció sokkal gyorsabb volt, mint a D-beépülés. Ebből *intramolekuláris mechanizmusra* lehetett következtetni (16. ábra). Az ábra két elvileg lehetséges intramolekuláris mechanizmust ábrázol: 1,3-szigmatróp hidrogénvándorlást, valamint két lépésben végbemenő 1,3-hidrogénvándorlást  $\pi$ -allil-komplexen keresztül. Bizonyításként szolgált a (+)-*exo-2,4-dideutero-apopinén*. A szuprafaciális 1,3-hidrogénvándorlás (amely termikusan szimmetriatiltott, adszorbeált állapotban azonban számításokkal igazolták realitását) nem nyert igazolást, hiszen



16. ábra

a D-eloszlásban a kiindulási molekulához képest nincs változás (e mechanizmus szerint az *endo*-H vándorol). A kísérleti tények a jobb oldali mechanizmust igazolják. Eszerint az *exo*-helyzetű D vándorlása miatt megváltozik az eredeti D-eloszlás (1:1 helyett 0:2 lett). Lényeges, hogy a vándorló deutérium a molekula alatt marad, ezért ez a folyamat gyorsabb, mint a molekulával nem takart katalizátorfelületen levő hidrogénnel vagy deutériummal lejátszódó csere.

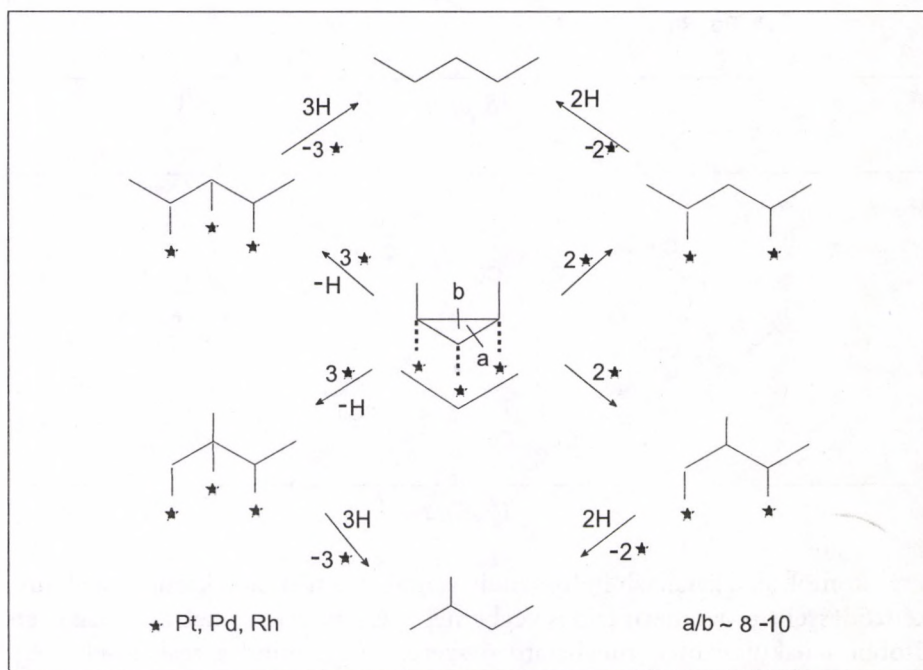
## Geometriai izomerek vizsgálata

Különböző *gyűrűs vegyületek geometriai izomerjei* hidrogenatív gyűrűfelnyílásának tanulmányozásával következtetéseket lehetett levonni a fém katalizálta hidrogenolízis sebességének és szelektivitásának a reaktáns térszerkezetétől való függésének megállapítására és a hidrogenolízis mechanizmusára vonatkozóan. A vizsgált vegyülettípusok *cikloalkánok*, *oxacikloalkánok*, *dioxacikloalkánok*. Katalizátorok: Ni-, Cu-, Rh-, Pd-, Pt-SiO<sub>2</sub>. Reakciókörülmények közül a hőmérséklet, valamint a reaktáns-hidrogén arány változtatása voltak a főbb paraméterek. Reakciósebességi értékeket, valamint regio- és sztereoszelektivitásokat határoztunk meg.

Legjelentősebb tájékoztatást a *háromtagú gyűrűk* vizsgálata nyújtott, ugyanis a feszült gyűrűk felnyílása igen alacsony hőmérsékleten is tanulmányozható,



amikor a mellékreakciók, valamint a másodlagos folyamatok szerepe alárendelt. Noha a reakciósebesség és a regioselektivitás változása jelentősen függ a reaktánstól, a fémtől, a hőmérséklettől, valamint a reaktáns-hidrogén aránytól, egyértelműen megállapítható, hogy a térszerkezetnek jelentős, az esetek többségében meghatározó szerepe van. A *cis*-izomerek reakciókészsége – néhány egyedi kivételtől eltekintve – nagyobb a *transz*-izomerekénél. Ez összefüggésbe hozható az adszorpció típusával: *cis*-vegyületek esetében főleg lapszerű adszorpció, míg a *transz* vegyületek esetében túlnyomórészt éladszorpció történik. A termékképződési sebesség – hidrogén nyomás függvények elemzése,

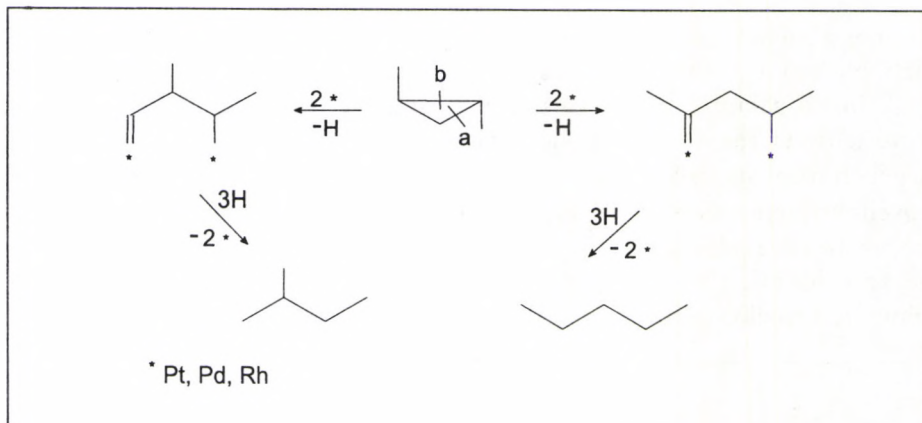


17. ábra

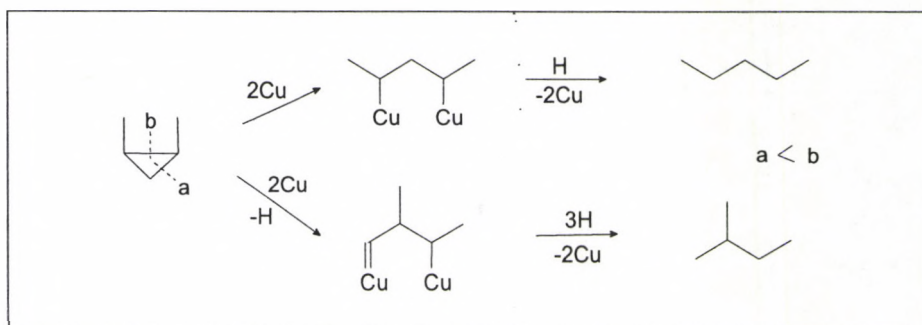
összehasonlítása és szterokémiai megfontolások alapján valószínűsítettünk átmeneti komplexeket és reakciómechanizmusokat.

A *cisz*-*di-Me* ciklopropán adszorpciója Rh-, Pt- és Pd-on a hőmérséklettől és a felületi hidrogénborítottságtól függően disszociatív vagy asszociatív planáris adszorpció, míg a *transz* vegyületé éladszorpció (17. és 18. ábra). A reakciósebességet meghatározó lépések *cisz* esetében az adszorbeált forma hidrogéneződése, míg *transz* esetén valószínűleg a felületi adszorpció. Rézkatalizátoron komplikáltabb a helyzet (19. és 20. ábra). A gyűrűfelnylási reakcióban ugyanis





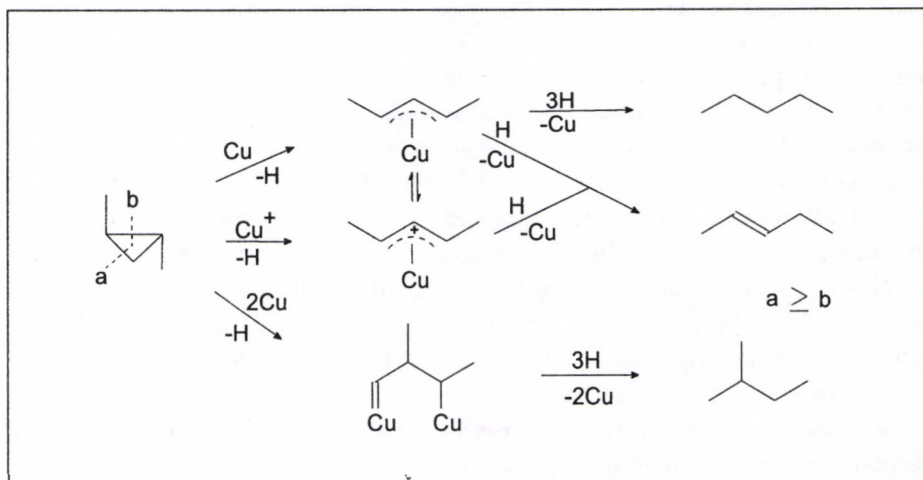
18. ábra



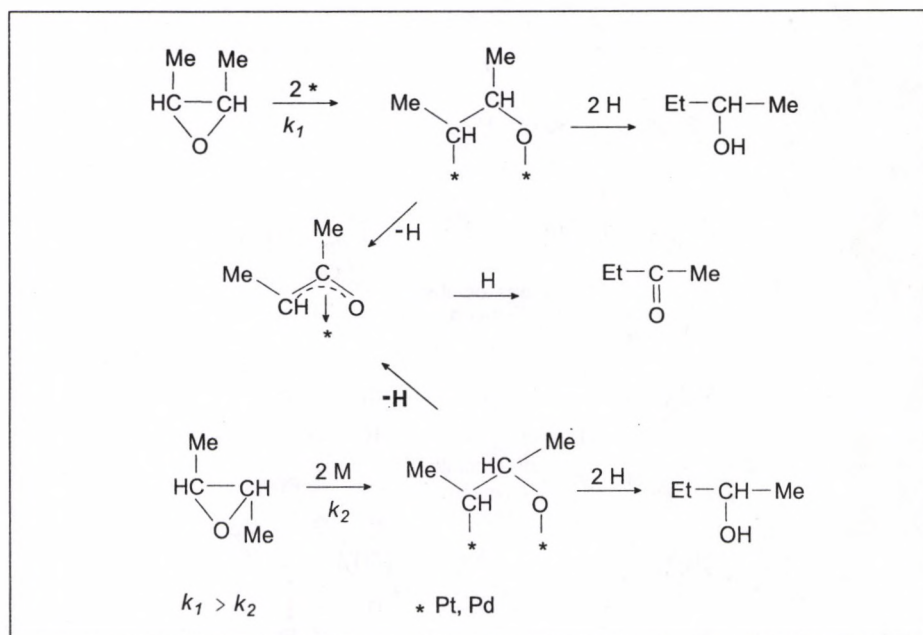
19. ábra

a rézatomok által katalizált hidrogenolízis mellett a rézionok katalizálta olefin-képződéssel járó izomerizáció is végbemegy. A térszerkezetnek azonban ezen utóbbi átalakulásban is meghatározó szerepe van, mind a reakciósebesség, mind a szelektivitás tekintetében. A réz esetén  $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ -on  $k(\text{cisz})=3k(\text{transz})$ , következésképpen adszorpciójuk geometriája eltérő (*cisz*-nél planáris, *transz*-nál éladszorpció). Magasabb hőmérsékleten a reakciósebességbeli különbség eltűnik, adszorpciójuk geometriája hasonló, és a geometriai okok ellenére a *transz* izomer esetén is planárishoz közel állónak kell lennie – ami *p*-allil komplex formájában valósulhat meg –, hiszen a képződő egyenes láncú olefin, a pentén-2 éladszorpcióval nem képződhet.

A *dimetil-oxirán* izomerek esetén a kísérleti eredmények a 21. ábrán vázolt reakcióséma felállítását tették lehetővé, amely jól mutatja a sztereokémiai faktorok meghatározó szerepét. Általában *hidrogén részvételével végbemenő C–O*



20. ábra



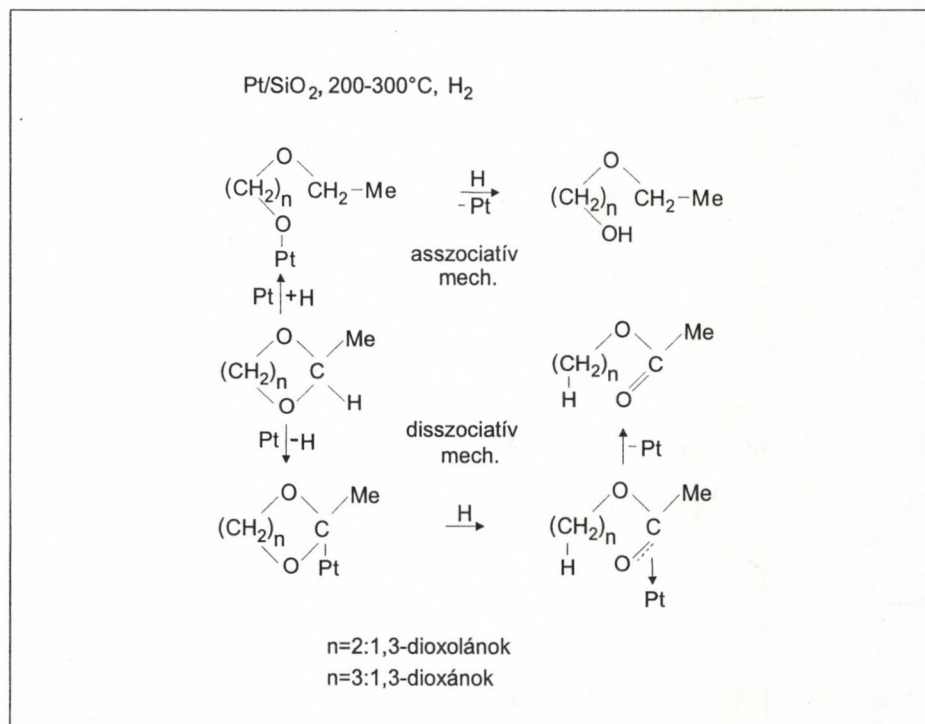
21. ábra

kötéshasadás zajlik le platina- és palládiumkatalizátoron. Jellemző erre a mechanizmusra, hogy a reakciósebesség nő a hidrogén parciális nyomásának növekedésével, a *cis*-izomerek átalakulási sebessége jóval nagyobb, mint a

*transz*-izomereké és a C–O kötés hasadása a szénatomon a konfiguráció inverzióját okozza. A jelenség magyarázatára feltételezzük, hogy a *cisz*-vegyület adszorpciója planáris, a sebesség-meghatározó lépés az 1,3-diadszorbeált felületi komplex továbbalakulása, míg a *transz*-vegyület esetén utóbbi kialakulása, mivel a metilcsoport gátolja a planáris adszorpciót.

A másik mechanizmus egy ionos típusú inzertálódás a C–O kötésbe. Ez a mechanizmus játszódik le nikkel- és rézkatalizátorokon. Erre a mechanizmusra az a jellemző, hogy a reakciósebesség a hidrogén parciális nyomásának növekedésével változatlan marad, a *cisz*- és *transz*-izomerek átalakulási sebessége azonos, és a C–O kötés hasadása a szénatomon a konfiguráció retenciójával jár. A reakciósebességet meghatározó lépés mindkét izomer esetén a felületi komplex deszorpciója.

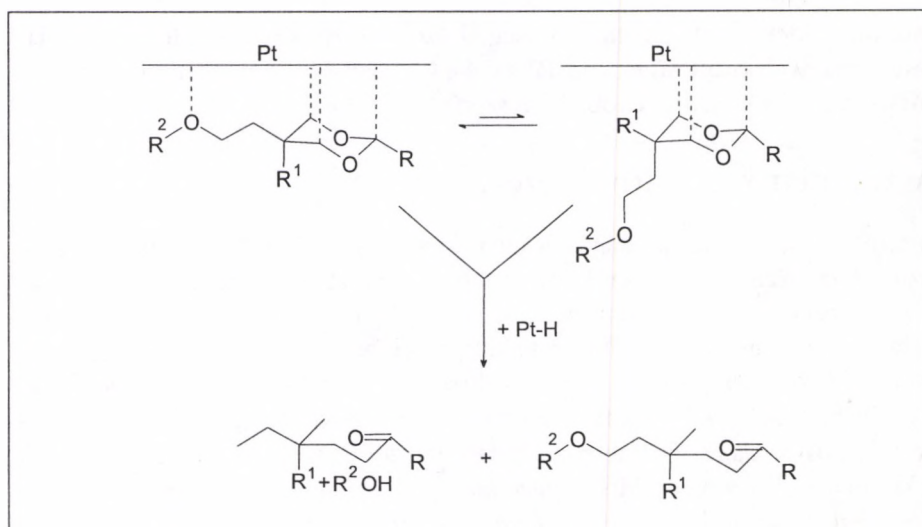
A különböző szerkezetű 1,3-dioxacikloalkánok (dioxolán-izomerek és dioxán-izomerek) platinafémeken, hidrogén jelenlétében történő izomerizációjának és hidrogenolízisének tanulmányozása nemcsak új sztereoselektív kontakt katalitikus folyamatok felismerését tette lehetővé, hanem első kísérleti



22. ábra

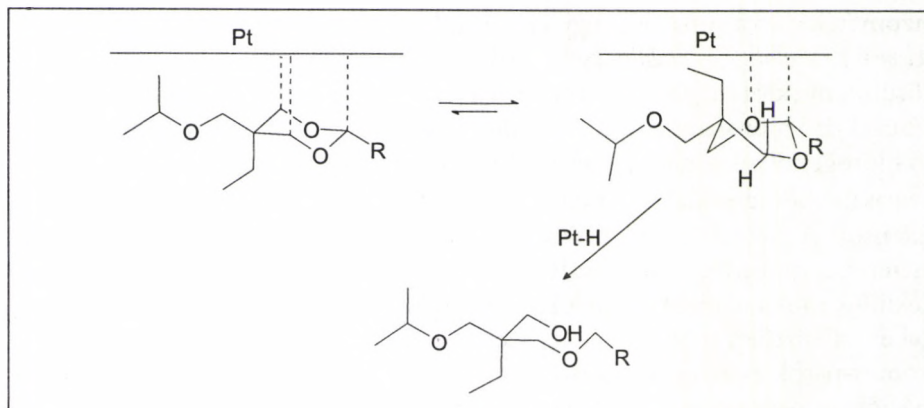


bizonyítékát adta annak is, hogy a *reaktáns konformációja meghatározó szerepet tölthet be a fémkatalitikus átalakulások szelektivitására*. A térszerkezettől és a reakció-körülményektől függő két kompetitív reakció megy végbe az észterek képződésével járó hidroizomerizáció és a diol-monoéterek keletkezését eredményező hidrogenolízis során (22. ábra). Az észterképződés kedvező paraméterei: a magasabb hőmérséklet, kisebb hidrogénborítottság, merev konformációjú reaktánsok. A mechanizmus disszociatív jellegű. A hidrogenolízis kedvező paraméterei: a viszonylag alacsonyabb hőmérséklet, nagyobb hidrogénborítottság, flexibilis molekulakonformációk. A mechanizmus asszociatív jellegű. A fentieket jellemzően mutatják be az azonos és a különböző konformációjú térizomer-párok esetén észlelt kísérleti eredmények. Ugyanis az azonos konformációban, nevezetesen székkonformációban lévő térizomerpárok esetén a fő folyamat az észterek képződéssel járó izomerizáció (23. ábra). A reaktáns a



23. ábra

dioxángyűrű axiális hidrogénjei oldaláról kötődhet a felülethez. A molekula ezen felfekvését az 5- $\beta$ -alkoxi-alkilcsoport horgonyzó hatás révén elősegítheti. A planáris adszorpciót az a kísérleti tény is bizonyítja, hogy az alkoxicsoporthidrogenolízisével járó termékek képződése is megfigyelhető volt (a másik térizomerpár esetén nem). A különböző konformációjú térizomerpárok esetén a dioxángyűrű CO-kötéseinek hidrogenolízise megy végbe. Észterképződés nem figyelhető meg (24. ábra). A fentiek mellett a sztereokémiai tényezők szerepét az 1,3-dioxánok átalakulásában egyértelműen bizonyítják: a térizo-



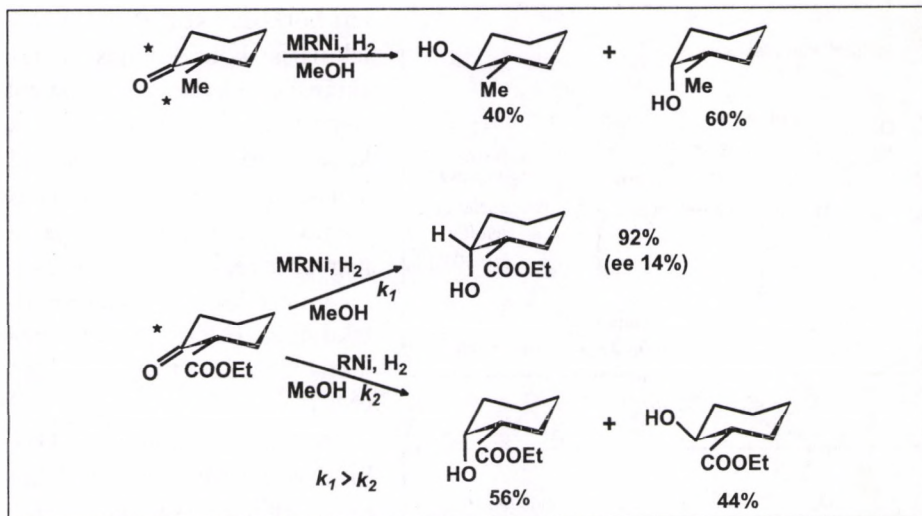
24. ábra

mer dioxa-dekalinok reakcióképessége közötti nagymértékű különbség, valamint a nagy térkitöltésű ekvatoriális C4-, C5-szubsztituensek, melyek a gyűrűt csavart kád konformációba kényszerítik.

## Aszimmetrikus hidrogénezés

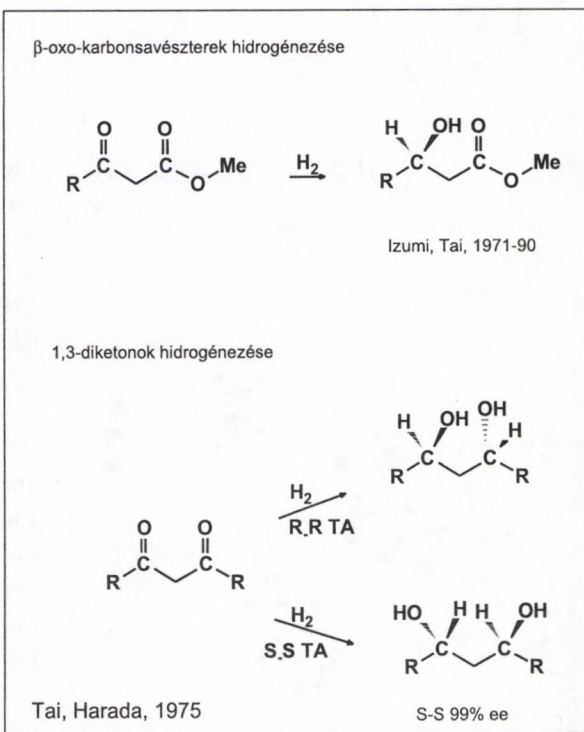
A fémkatalízis sztereokémiájának talán leglényegesebb területének az *aszimmetrikus szintézisek* tekinthetők. Az utóbbi években bekövetkezett szinte *robbanásszerű fejlődést*, a gyakorlati igény katalizálta (enantiomerek eltérő biológiai hatása, gazdaságossági szempontok, környezeti terhelés). Rabó Gyula a katalízis nemzetközi kongresszusán így fogalmazott: „Az 1990-es éveket kétségkívül a *kiralitás évtizedének* fogják nevezni.” Ebben a rendkívüli gyakorlati jelentőségű folyamatban az aszimmetrikus heterogén fémkatalitikus hidrogénezésnek is kiemelkedő szerep jut. Hiszen *nagy mennyiségű királis anyag előállítására ad lehetőséget katalitikus mennyiségű királis forrás*. E téren lényegében két módszer van a kutatások középpontjában: a hordozón lévő fémet királis anyaggal módosítják, vagy a katalizátorhoz adva a módosítót, vagy a katalizátort is tartalmazó elegyhez adják a módosítót. A két legismertebb katalizátor a *borkőssavval módosított Raney nikkell* és a *cinkóna-alkaloidokkal módosított hordozós platínakatalizátor*. Jelentős eredményekről számol be a szakirodalom, de egy-egy eljárás kifejlesztéséhez még mindig óriási erőfeszítésekre van szükség, hiszen a nagyszámú kísérleti adat ellenére sincs konszenzus sem a királis aktív helyek természetéről, sem az enantioszelektivitást meghatározó tényezőkről. Újabb és újabb munkahipotézisek vannak kialakulóban, amelyekről az e téren tartott speciális konferenciák is tanúskodnak. A leglényegesebb cél természetesen – az enzimek



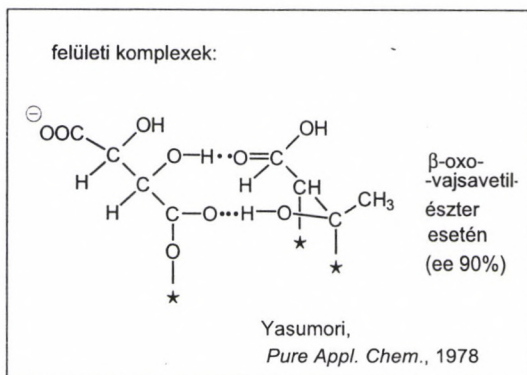


25. ábra

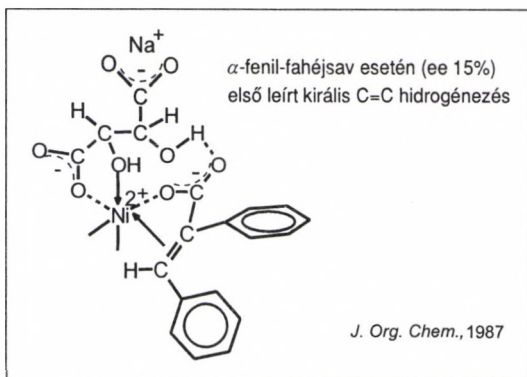
mintájára – a legtökéletesebb geometriai összhang megteremtése a prokirális reaktáns és a katalizátor között. Erre vonatkozóan egy egyszerű példát legyen szabad bemutatni. A 25. ábrán vázolt példa borkósavval módosított katalizátoron lejátszódó hidrogénezés esetén az intermolekuláris kölcsönhatásoknak a hidrogénezés sztereokémiájára gyakorolt szerepét mutatja be. Mivel a Me-csoport és a borkósav között nincs kölcsönhatás, mindkét irányú (ekvatoriális és axiális) hidrogénaddíció bekövetkezik. A karboetoxi-csoport és a felü-



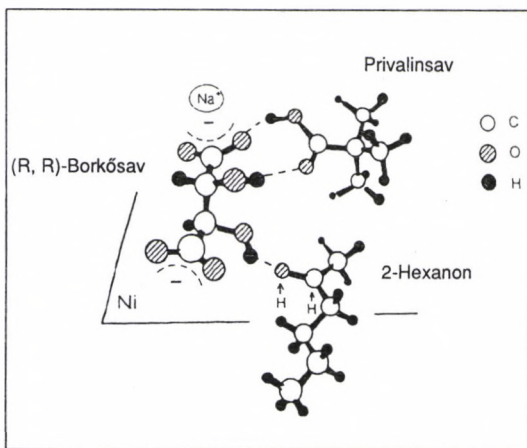
26. ábra



27. ábra



28. ábra

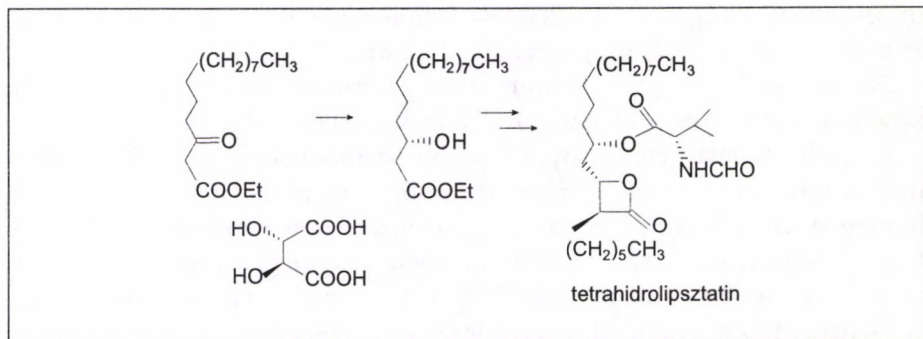


29. ábra

leti borkósav közötti intermolekuláris kölcsönhatás a reaktánst az ekvatoriális oldalról rögzíti a felületen, aminek következménye az axiális OH kialakulása. A kölcsönhatás jelentős szerepét mutatja a nagyobb reakciósebesség és a nagymértékű diasztereoselektivitás. (Némi enantioszelektivitás is megfigyelhető volt.)

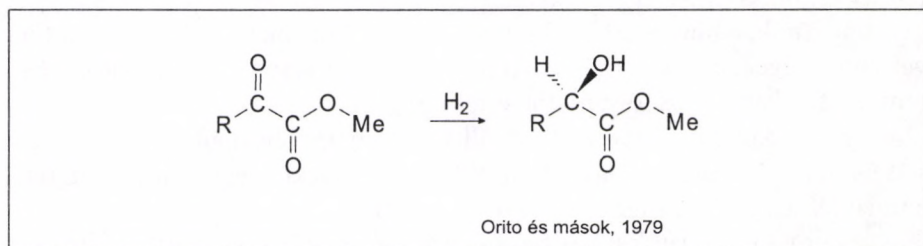
Borkósavval módosított nikkelon β-oxo-karbonsavésztereket és 1,3-diketonokat lehet nagy enantioszelektivitással (≈90%) hidrogénezni (26. ábra). A felületi komplexek szerkezetére számos variáció található a szakirodalomban, függően a reaktánstól és természetesen a szerzőktől: pl. β-oxo-vajsavetilészter esetén (27. ábra) vagy az α-fenil-fahéjsav esetén (28. ábra) vagy a 2-hexanon esetén (29. ábra). Pivalinsav komo-difikátor szerepe: intermolekuláris kölcsönhatás útján rögzíti a 2-hexanont a felületen. Iparilag is megoldott termék a *tetrahidrolipsztatin* (egy lipáz inhibitor) (30. ábra). Az előállítás kulcslépése aszimmetrikus hidrogénezés (6–100 kg dimenzió, Hoffmann-de La Roche).

Cinkóna-alkaloidokkal módosított Pt katalizátorok az α-oxo-karbonsavészterek aszimmet-

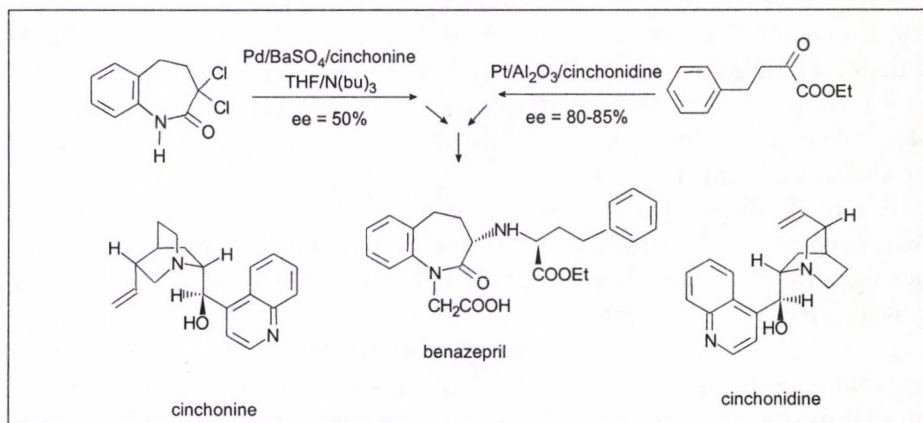


30. ábra

rikus hidrogénezésére bizonyultak alkalmasnak (31. ábra). Piroszölősav-észterek esetén 95%-os enantioszelektivitást is leírtak. Felületi komplexek tekintetében itt is számos szerkezet és ennek megfelelően több magyarázat található. Egy ilyen folyamat is ipari bevezetésre került, nevezetesen a *benazepril* (vényo-



31. ábra



32. ábra



máscsökkentő gyógyszer; 10–200 kg-os dimenzió Ciba-Geigy). A kulcslépés az  $\alpha$ -ketoészter királis hidrogénezése (32. ábra).

Néhány gyakorlati példa bemutatásával próbáltam illusztrálni a heterogén katalitikus sztereokémiai kutatások állásának jelenlegi helyzetét.

Az eddigi kutatási eredmények az alábbi szempontokra hívják fel a figyelmet: a sztérikus hatások szerepe nagyobb, mint az oldatokban lejátszódó homogén katalitikus reakciókban, a kémiai történést nemcsak a reaktánsok térszerkezete, hanem a szilárd felület geometriája is meghatározza, az adszorpció során – a reakció körülményeitől függően – nemcsak a reaktáns konformációja, hanem a katalizátor felületi rendezettsége is megváltozik, azaz kölcsönösen hatnak egymásra, meghatározó tényező a geometriai összhang kialakulása a felület és a reaktáns között, a reaktáns a legkevésbé gátolt oldalról adszorbeálódik a felületre, a reagáló molekuláknak térben hozzá kell férniök az aktív centrumokhoz, a sztereokémiai és elektronikus tényezők általában nem választhatók szét.

Az összefoglaló jellegű áttekintést legyen szabad zárnom az alábbi következtetésekkel, illetve megjegyzésekkel:

- úgy tűnik, a homogén katalitikus folyamatokra vonatkozó térkémiai törvényszerűségek, célszerű módosításokkal, eredményesen alkalmazhatók a heterogén fémkatalitikus folyamatok értelmezésére;

- ugyanakkor sajnálattal kell megállapítani, hogy olyan általános törvényszerűségek felállítására még nem került sor, amelyekkel egy reakció sztereokémiai lefutását előre meg lehetne mondani;

- az eddigi vizsgálatok igazolták, hogy a sztereokémiai vizsgálatok lényeges ismereteket nyújtanak a reakciómechanizmusok felderítéséhez;

- nagy jelentőségűnek kell tartanunk, hogy a heterogén katalitikus folyamatok sztereokémiájára vonatkozó vizsgálatok eredményei ma már nélkülözhetetlenek a szintetikus szerves kémia gyakorlatában;

- a heterogén katalitikus királis szintézisek kivitelezése sokoldalú, komplex sztereokémiai tanulmányok és vizsgálatok nélkül nem juthatott volna el a mai produktív szakaszába.

A fentiek alapján látható, hogy még nagy feladatok várnak a kutatókra, hiszen, egyetértve a már idézett kongresszussal, „a kutatók mélyen bent vannak ugyan az alagútban, de az ismeretek felhalmozódása ellenére ma még csak keresik a fényt az alagút végén”.

Mivel ez alól nem kivétel a bemutatott részterület sem, remélhetőleg nagyobb előrelépés várható a jövő évi bázeli szimpóziumtól, amely kiemelt programjává tette a heterogén katalitikus szerves kémiai reakciók sztereokémiája legújabb eredményeinek áttekintését.



Görög Sándor

az MTA rendes tagja

# A GYÓGYSZER- ANALITIKA SZÉPSÉGEI

Elhangzott 1996. január 16-án (részletek)

## I.

Közel 37 éve dolgozom analitikusként a gyógyszeriparban. Úgy gondolom, ennyi év után indokolt volt, hogy az erre az előadásra való felkészülés közben feltettem magamnak a kérdést: mire fel mindez? Mi a gyógyszer-analitika értelme és célja, különös tekintettel az ipari gyógyszeranalízisre? *Miért analizáljuk gyógyszereinket?* Erre a kérdésre két objektív választ fogalmaztam meg. Ezeket fogom bemutatni és röviden kommentálni az előadás bevezetőjében. Maga az előadás egy harmadik, de az előzőekkel ellentétben teljesen szubjektív válasszal fog kezdődni, és azt fogom számos példával illusztrálni.

Lássuk tehát a két objektív választ a feltett kérdésekre. Az első, talán kissé fennköltén hivatalos választ úgy fogalmaztam meg, hogy a gyógyszer-analitika értelme és célja, különös tekintettel az ipari gyógyszeranalízisre, az, hogy a gyógyszeralapanyagok, ezek gyártási intermedierei, a gyógyszerkutatás termékei (potenciális farmakonok), kisserelt gyógyszerkészítmények, gyógyszerek szennyezései és bomlástermékei, a gyógyszereket, illetve metabolitjaikat tartalmazó biológiai minták analitikai vizsgálatával olyan adatok birtokába jussunk, amelyek segítségével hozzájárulhatunk a gyógyszeres terápia maximális hatékonyságához, maximális biztonságához és a gyártási eljárások maximális gazdaságosságához.

A második válasz lényegesen rövidebb és pragmatikusabb: gyógyszereinket azért analizáljuk, hogy el tudjuk adni őket, vagyis el tudjuk fogadtatni egyrészt

a hatóságokkal, másrészt kereskedelmi partnereinkkel, figyelembe véve a gyógyszerek minőségével szemben támasztott követelmények folyamatos, nagymértékű növekedését.

Erre természetesen azt lehet mondani, hogy ez a két válasz nincs egymással ellentétben, hiszen a hatóságok és a kereskedelmi partnerek is azért emelik folyamatosan igényeiket a gyógyszerek minőségével szemben, hogy ezzel ők is hozzájáruljanak a gyógyszeres terápia biztonságához. Ez igen nagy mértékben valóban így van. Ezek az igények a gyógyszer-analitika eszköztárának az utóbbi években végbement látványos gazdagodásával együtt rendkívüli mértékben megnövelték a gyógyszeres terápia biztonságát. Bizonyos irracionális elemek azonban időnként belekeverednek a minőségi követelmények növelésébe. Ilyennek kell minősítenem az olyan eseteket, amikor kereskedelmi partnereink az általánosan elfogadott 0,1%-os limit alá menve már 0,01% nagyságrendű szennyezésre vonatkozóan is minőségi és mennyiségi információt kérnek még olyan esetben is, amikor a kérdéses gyógyszer napi dózisa 100  $\mu\text{g}$  körül van. Ebben az esetben a szennyezés napi 10 nanogrammm nagyságrendben kerül be a szervezetbe, aminek nyilvánvalóan nincs fiziológiás jelentősége.

Egy másik példa gyógyszeralapanyagok nyomoldószer-tartalma meghatározásának bizonyos vonatkozásai. Itt gyakran olyan oldószerek mikrogrammos mennyiségeinek a szervezetbe való bejutása ellen küzdünk nagy technikai apparátussal és igen költséges analitikai módszerekkel, amelyek környezetünkől vagy élelmiszerekből esetenként nagyságrenddel nagyobb mennyiségben kerülnek be szervezetünkbe. Egy pohár bor elfogyasztása esetén pl. 10 mg nagyságrendben veszünk magunkhoz metanolt, sőt még egy olyan ártatlan italban is, mint a paradicsom-ivólé – a pektin-metil-hidroláz enzim működésének következtében – ennek a mennyiségnek a többszöröse is jelen lehet.

További destruktív példák helyett most megadom a harmadik, ígéretem szerint teljesen szubjektív választ a feltett kérdésre, amit akár vallomásnak is tekinthetnek. Miért analizáljuk tehát gyógyszereinket? A már elmondottakon túlmenően azért, mivel számomra a gyógyszer-analitika nemcsak az analitikának, hanem az egész kémiának is a legszebb ágazata, amely egyrészt a problémák, a vizsgálandó anyagok végtelen sokféleségével és változatosságával, másrészt pedig a problémák megoldására rendelkezésre álló módszerek hosszú, állandóan növekvő sorával arra készíti a gyógyszer-analitikust, hogy saját magát, ismeretanyagát és szemléletmódját állandóan megújítsa. Ez egy olyan tudományterület, amely az ezt művelő számára nemcsak a problémák megoldása felett érzett örömet szolgálhatja, hanem – amint azt előadásomban igyekszem bemutatni – kifejezetten intellektuális, sőt még azt is megköckéztatom, hogy esztétikai gyönyörűségeket is.



## II.

Hogyan jelentkeznek ezek a szépségek a gyógyszer-analitikus számára? Ezt a kérdést két oldalról lehet megközelíteni: a vizsgált problémák és az alkalmazott módszerek oldaláról. Számomra az jelenti az igazi szépséget, ha *kémiai reakciókkal* foglalkozhatok. Lássuk tehát, milyen típusú reakciókkal találkozunk munkája során a gyógyszer-analitikus!

1. Az első típust azok a reakciók képezik, amelyekkel a *gyógyszereket előállítják*. Az ipari gyógyszer-analitikus feladatai közé tartozik ezeknek a reakcióknak analitikai módszerekkel való vizsgálata. A vizsgálat egyrészt azt célozza, hogy megismerjük a reakció kinetikai és konverzió-viszonyait a hozam növelése, optimalása céljából, másrészt a mellékreakciók felderítésével megalapozhatók a nagy fontosságú szennyezésprofil-vizsgálatok. A hosszú pályafutásom alatt megvizsgált számtalan reakció közül példaként fenol-szteroid-metil-éterek cseppfolyós ammóniában fém nátriummal végzett *Birch-redukciója* mellékreakcióinak ez utóbbi szempontból való tanulmányozását mutatom be [1, 2]. A reakció fontosságát az határozza meg, hogy a redukcióval nyert 3-metoxi-2,5(10)-diének a gyógyászati szempontból nagy fontosságú 19-norszteroidok (pl. nortesztozteron-észterek, noretiszteron, norgesztrel, etinodiol-diacetát stb.) szintézisének kulcs-intermedierjei, a reakció melléktermékeinek megismerése tehát megalapozza a felsorolt gyógyszerek szennyezésprofil-vizsgálatát.

A vizsgálatot a Birch-redukciót követő sósavas hidrolízis 4-én-3-ketoszteroid típusú nyerstermékének gázkromatográfia-tömegspektrometriás (GC-MS) vizsgálatára alapoztuk, amit analitikai és preparatív nagy hatékonyságú folyadék-kromatográfiás (HPLC), ultraibolya és NMR spektroszkópiás vizsgálatok egészítettek ki. Ezek számos melléktermék felismeréséhez vezettek. Ezek közül a fontosabbak sztereoizomer 4-én-3-keto, 1-én-3-keto és telített 3-keto származékok, 3-deoxo-4-én, 3-deoxo-1-én, 3-deoxo-1(10)-én, szubsztituálatlan 1,3,5(10)-trién származékok, valamint 3-metoxi-monoén izomerek.

2. A gyógyszeranalitikus által vizsgálat tárgyává tett másik reakciótípus *gyógyszerek bomlása* mind normális tárolás, mind pedig extrém körülmények között. A feladat itt egyrészt a bomlási reakció kémiájának tisztázása, bomlás-specifikus analitikai módszer kidolgozása a reakció követésére, mennyiségi értékelése, másrészt kinetikai vizsgálatok elvégzése, amelyek lehetővé teszik az Arrhenius-egyenlet alkalmazását.

Az első feladattípus példaként az *Arduán* injekció hatóanyagának, a *pipecuronium-bromidnak* stabilitásvizsgálatát mutatom be [3]. Itt az oxidatív bomlás a 16-os helyzetű metil-piperazin csoporton játszódik le, és 2',3'-dehidro-pipecuronium-bromidhoz vezet. Mivel ezt az intenzív ultraibolya



spektrummal rendelkező bomlásterméket folyadék-kromatográfiás mérése során erősen túlértékeljük a spektrofotometriásan csak igen gyengén aktív pipecuronium-bromidban való mérése során, a mérés validálása és a bomlástermék-szennyezés standard mennyiségi jellemzése céljából szükség volt a HPLC-től és UV spektrofotometriától teljesen független módszerre: ezt az NMR spektroszkópiában találtuk meg. A mérések során 4-androsztén-3,17-diont használtunk belső standardként. A bomlástermék vinil-protonjainak 5,26 és 6,19 ppm-nél megjelenő dublettjeinek, ill. a belső standard 4-es helyzetű protonja 5,67 ppm-nél levő szingulettjének integráljaiból a bemérések és a molekulasúlyok figyelembevételével a bomlástermék ismeretlen koncentrációja kiszámítható.

Az extrém körülmények között végbemenő bomlási folyamatok kinetikai vizsgálatára a példa a klinikai kipróbálás alatt álló *posatirelin* nevű tripeptid (L-Kpc-L-Leu-L-Pro-NH<sub>2</sub>) 0,01 M sósavban, illetve nátrium-hidroxidban lejátszódó bomlásának vizsgálata HPLC módszerrel [4, 5]. Megállapítható volt, hogy savas közegben a főreakció a ketopipekolinsav egység laktámglyűrűjének hidrolitikus felhasadása amino-adipinsav egységgé, amit csak kisebb mértékben kísér a terminális prolin-amid egység savvá való hasadása. Hasonló a helyzet lúgos közegben, azzal a különbséggel, hogy itt főreakcióként jelentkezik az L-Kpc egység epimerizációja is D-Kpc-vé. A reakciósebességek hőmérsékletfüggésének vizsgálata és az ennek során nyert, lúgos közegben egymást metsző Arrhenius-egyeneselek tanulmányozása során azt lehetett megállapítani, hogy az epimerizáció aktiválási energiája nagyobb, mint a lúgos hidrolízisé: alacsony hőmérsékleten az utóbbi, 50 °C felett pedig az előbbi reakciósebessége a nagyobb.

3. A harmadik reakciótípus, amellyel munkája során a gyógyszer-analitikus találkozik, gyógyszerek élő szervezetben végbemenő *metabolizmusa*. Itt az elsődleges feladat a metabolitok szerkezetének meghatározása. Példaként egy ilyen komplex vizsgálat egy részfeladatának megoldását mutatom be. A klinikai kipróbálás alatt álló *bisaramil* patkányvizelet metabolitjainak vizsgálata során az oszlop-kromatográfiásan elkülönített poláris frakcióban fordított fázisú HPLC módszerrel két nagyobb metabolitot találtunk. A HPLC-MS vizsgálatok szerint ezek a molekula p-klór-benzoil egységén mono-, illetve dihidroxilezett származékok. A hidroxilcsoportok kötődési helyét a folyadék-kromatográf diódasoros UV-detektorával nyert ultraibolya spektrumok alapján határoztuk meg [2].

4. A gyógyszer-analitikus nemcsak vizsgálja, hanem fel is használhatja a *kémiai reakciókat saját analitikai feladatainak megoldására*. Gyógyszer-analitikusi pályám kezdetén, az 1960–1970-es években, az analitikus rendelkezésére álló műszeres technikáknak akkor még (különösen hazai viszonylatban) igen szerény színvo-



nala miatt kémiai reakciók alkalmazása a feladatok megoldására nélkülözhetetlen volt. A nagy teljesítőképességű spektroszkópiás és kromatográfiás módszerek elterjedésével a kémiai reakciók szerepe a gyógyszer-analitikában természetesen némileg csökkent ugyan, de a származékképzési reakciók ma is fontos eszközei a gyakorlati feladatok megoldásának. Így magam is kitűnően tudom egész a mai napig alkalmazni a korábban különösen a szteroid analitika [6–8] és a spektrofotometriás analízis [9] területén kidolgozott, kémiai reakciókon alapuló módszereket vagy legalábbis az ezekkel a reakciókkal szerzett tapasztalatokat új analitikai feladatok korszerű módszerekkel való megoldása során is.

Az elmondottakra első példaként ecetsav-hangyasav vegyes anhidriddel mint analitikai reagenssel kapcsolatos tapasztalatainkat ismertetem. Ezt pályám kezdetén vezettük be a *titrimetriás analízisbe* tercier aminok primer és szekunder aminok jelenlétében való szelektív meghatározására [10]. Ennek a reagensnek előnyei az erre a célra általánosan alkalmazott ecetsav-anhidriddel szemben a sokkal nagyobb reakcióképesség és a keletkező savamidok sokkal kisebb bázicitása.

Évtizedekkel később ugyanezt a reakciót sikerrel alkalmaztuk a jelenkori gyógyszer-analitika egyik legfontosabb feladatköre, az enantiomerek kromatográfiás elválasztásán alapuló *királis analitika* területén. Ismeretes ugyanis, hogy szabad primer aminocsoportot tartalmazó vegyületek enantiomerjei csak igen gyengén választhatók el az ez idő szerint kereskedelmi forgalomban levő egyik legnagyobb teljesítőképességű királis HPLC oszlop, az immobilizált  $\alpha_1$  savas glikoproteint tartalmazó Chiral AGP segítségével. Amint azt alanin-benzilészter enantiomerek elválasztásának példáján bemutatom, a probléma megoldható volt az utóbbi  $\alpha$ -aminocsoportjának a fenti reagenssel való formilezése segítségével [11].

Hasonlóan „újjaéleszthető” volt az a kettős származékképzésen alapuló módszer, amit még a 70-es évek kezdetén dolgoztunk ki 21-amino-, illetve 21-hidroxi-kortikoszteroidok meghatározására. Az előbbiek ugyanis szelektíven oxidálhatók higany(II)-kloriddal 20-keto-21-aldehid származékká. Ez a reakció kihasználható volt ilyen származékok igen szelektív meghatározására a keletkező higany(I)-klorid *gravimetriás* mérése [12] alapján, *vékonyréteg-kromatográfiás* detektálásukra [13] és – 4,5-dimetil-o-feniléndiaminos kondenzáció mint második reakció után – *spektrofotometriás* [14] meghatározásukra. Ezek a módszerek igen hasznosnak bizonyultak a *mazipredont* tartalmazó *Depersolon* készítmények analízisének és stabilitásvizsgálatánál. A spektrofotometriás módszer 21-hidroxi-kortikoszteroidokra is alkalmazható; ez esetben azonban réz(II)-acetátot kell alkalmazni oxidálószerként [15]. Ez utóbbi reakciók egy japán kutatócsoporttal való együttműködés eredményeként új alkalmazást nyertek mint egy előzetes derivatizációs módszer reakciói 21-hidroxi-kortiko-



szteroidok vizeletből való *nagy hatékonyságú folyadék-kromatográfiás* meghatározásánál [16].

Számos más kondenzációs típusú reakciót is alkalmaztam pályám első szakaszán elsősorban *spektrofotometriás* vizsgálatokban. Így pl. bevezettem a dietil-oxalátos Claisen-kondenzációt aktív metilénsoportot tartalmazó ketoszteroidok analízisére [17, 18], anilinnel [19], illetve 2-nitro-fenil-hidrazinnal [20] való kondenzációt spektrofotometriásan inaktív karbonsavak meghatározására, piridint mint analitikai reagenst 21-halo-, ill. 21-aktív észtert tartalmazó kortikoszteroidok mérésére [21]. Ezekkel a – ma már korszerűtlennek tekinthető és általunk sem használt – módszerekkel szerzett tapasztalataink kitűnően gyümölcsöztethetők voltak aktuális analitikai feladatok korszerű módszerekkel való megoldása során. Így pl. a védett aminocsoportot tartalmazó aminosavak, illetve aktív észterek *enantiomer tisztaságának HPLC módszerrel való meghatározására* bevezettük a homokirális O-(4-nitro-benzil)-tirozin-etilészter-reagenseket.

A szabad karbonsavak esetén DCC-s, aktív észterek esetén pedig anélküli kondenzáció során képződő diasztereomer párok akirális HPLC oszlopokon jól elválaszthatók és az enantiomer szennyezések mérhetők [22, 23]. Végül a legkorszerűbb gyógyszer-analitikai technika a *kapilláris elektroforézis* területén is sikerrel alkalmaztunk egy kondenzációs reakción alapuló származékképzési módszert: az elektromos töltést nem tartalmazó, tehát elektromos térben nem vándorló lipofil ketoszteroidok is vizsgálhatóvá válnak ezzel a módszerrel, ha keto-csoportjaikat előzetesen kondenzáljuk Girard P- vagy T-reagensekkel. Ezzel a módszerrel számos ketoszteroid-elválasztási feladat volt megoldható az UV detektálhatóság egyidejű javítása mellett [24].

Végül megemlítem, hogy a klasszikus értelemben vett, kovalens kötések képződésén alapuló származékképzési reakciókon túlmenően a korszerű gyógyszer-analitikában egyre nagyobb szerephez jutnak a dinamikus addukt-képzésen, pl. *ionpároképzésen* alapuló módszerek. Perklorátiónnal alkotott ionpárok képzésén alapuló HPLC módszer segítségével pl. számos kényes elválasztási problémát sikerült megoldanunk peptidek és szteroidok körében, így pl. *pipecuronium bromid* szennyezéseinek (köztük a már említett 2',3'-dehidro származéknak) elválasztását [25].

### III.

Előadásom második felében egy jelenséget szeretnék bemutatni és azt egy példával illusztrálni. Ezt *Menuhin-effektus*nak neveztem el. Yehudi Menuhin, a kiváló hegedűművész olyan analógia kapcsán került bele ebbe a képbe, hogy



számos más szőlőmuzsikus pályatársával együtt, Pablo Casaltól egészen Vásári Tamásig, pályája második felében ő is egyre gyakrabban cseréli fel szőlőhangszerét a karmesteri pálcával. Természetesen nem szeretném a magam jelentőségét az analitika területén összehasonlítani Yehudi Menuhin jelentőségével az egyetemes zenekultúrában. A motivációját sem ismerem, ami erre a lépésre készíti. A párhuzamosságot ott érzem, hogy számos más, vezető pozícióba került gyógyszer-analitikus pályatársamhoz hasonlóan nekem is be kellett látnom, hogy a rendkívül gyors fejlődés következtében előbb-utóbb le kell mondanom még azoknak a gyógyszer-analitikai technikáknak aktív műveléséről is, amikben ifjabb koromban bizonyos eredményeket értem, hiszen fiatalabb munkatársaim hovatovább már a közelébe sem engednek az új generációjú, komputerizált műszereknek. Mi marad ezek után a magamfajta, vezető pozícióba került, de a gyógyszer-analitikát még magas hőfokon szerető kutató számára? A karmesteri pálca! Ilyen tevékenységre napjainkban, a specializáció korában egyre nagyobb szükség van. A jelenkori gyógyszer-analitikában a feladatok száma és bonyolultsága egyre növekszik, és velük együtt nő a megoldásukra rendelkezésre álló analitikai technikák száma és bonyolultsága is. A feladatok gyors és hatékony megoldása céljából ezeket a technikákat egyidejűleg és összehangoltan kell alkalmazni: ez igényeli a karmesteri tevékenységet. Ez a tevékenység annyi intellektuális örömet hoz magával, hogy az bőven kárpótol azért a veszteségért, amit a műszeres mérés direkt lehetőségének elvesztése okoz. Úgy gondolom, hogy ez hasonló lehet ahhoz az örömhöz, amit Yehudi Menuhin és pályatársai éreznek akkor, amikor a saját szőlőhangszereikkel megszerzett tapasztalataikat és a zenéről ily módon kialakított képüket egy magasabb szinten, a zenekaron keresztül is ki tudják fejezni.

Az elmondottakra egyetlen példát szeretnék ismertetni, ahol egy gyakorlati feladat gyors megoldása szinte valamennyi rendelkezésünkre álló analitikai technika összehangolt, komplex alkalmazását igényelte. A feladat *norgesztrel szennyezésprofil- vizsgálata* során került előtérbe. Ennek a totálszintézissel előállított szteroidnak bonyolult a szintézise, és a sokféle mellékreakció lehetőség miatt igen bonyolult a szennyezésprofilja is; ezzel korábbi közleményeinkben foglalkoztunk [2, 26]. A minőségi követelményeknek a bevezetésben említett emelkedése miatt szükségessé vált egy addig részletesen nem tanulmányozott, az USP-XXIII *vékonyréteg-kromatográfiás* rendszerében 0,83-as  $R_f$  értéknél megjelenő kis intenzitású folt vizsgálata, amelynek mennyiségére vonatkozóan foszfor-molibdénsavas előhívás utáni *denzitometrállás* segítségével lehetett (főanyagban kifejezett) adatokhoz jutni. A folt direkt *reflexiós UV spektruma* és a folt-elúciót követő *UV spektrofotometriás és tömeg-spektrometriás* vizsgálatok során nyert spektrumok tanulmányozása során megállapítható volt, hogy a szennye-



zés a teljesen újszerű 3,17-bisz-etinil szerkezettel rendelkezik, ahol a 3-as helyzetű etinilcsoport két kettős kötéssel van konjugációban. A szennyezés keletkezésének magyarázata a szintézis utolsó intermediérének, a 13-etil-4-gonén-3,17-dionnak nem teljesen regioszelektív etinilezése a 17-es helyzetben, amikor is csekély mennyiségben 3-etinil vegyület is keletkezik. Ennek a karbinolnak az etinilezési reakcióelegy feldolgozása során végbemenő savkatalizálta dehidratálása vezet az említett dienin típusú szennyezéshez. A kettős kötések helyzetét az UV spektrumok tanulmányozása és a Woodward-szabály alkalmazása révén csak valószínűsíteni lehetett. A pontos meghatározás céljából a *szintetikus*an előállított bisz-etinil-karbinol *preparatív HPLC* módszerrel való frakcionálása, majd UV spektrofotometriás módszerrel követett savkatalizált dehidratálása útján a szennyezés előállítható, volt és az így nyert mintából *NMR spektroszkópia* segítségével a kettős kötések helye és így a szennyezés pontos szerkezete is megállapítható volt: 13-etil-3,17 $\alpha$ -dietinil-3,5-gonadien-17-ol. A szintetizált anyag és a keresett szennyezés azonosságát az UV spektrumok azonosságán túlmenően a vékonyréteg-kromatográfiás  $R_f$  értékek, valamint a *nagyhatékonyságú folyadék-kromatográfiás (HPLC)* és *gáz-kromatográfiás* retenciós idők azonossága is bizonyította.

A bisz-etinil-karbinol ( $\lambda_{\max}=205$  nm) dehidratálásának már említett UV spektrofotometriás követése során azt az érdekes megfigyelést tettük, hogy a reakció nem egy lépésben megy végbe. Először (tömeg-spektrometriásan és NMR spektroszkópiával igazoltan) hidroxilvándorlás révén 13-etil-3,17 $\alpha$ -dietinil-3-gonén-5 $\beta$ ,17-diol keletkezik (225 nm), majd ez alakul át az azonosított szennyezéssé (268 nm). Ennek további lassú (gyakorlati szempontból már nem jelentős) átalakulása egy 279 nm-nél abszorpciós maximummal rendelkező terméké valószínűleg a hármas kötés víz-addíciójának következménye. A három lépés során előálló négy szerkezet egymástól jól elkülönülő UV spektrumai és ezek időben igen jól követhető átalakulásai egymásba a szakmai örömkön túlmenően intellektuális, sőt olyan esztétikai élvezetet is jelentenek a gyógyszer-analitikus számára, ami összemérhető azzal az élvezettel, amihez egy nagy képtárban egy világhírű festmény szemlélése során lehet jutni. Egy-egy spektrumot kiragadva a sorozatból, azok végtelenül leegyszerűsített, megnyúlt formáinak feszültsége nekem egy *El Greco-kép* eksztatikus áhítatát idézi. Ha viszont az átmeneti állapotokat reprezentáló spektrumok egymásra rakódó, lágy formáinak összességét szemléljük, akkor az egy impresszionista festménynek, pl. egy *Renoir*-vászonnak hangulatát hozza el számomra.

Visszatérve a gyógyszer-analitika realitásaihoz, az említett HPLC módszer és a szintetikusan előállított szennyezésstandard lehetővé tették a szennyezés pontos mennyiségi meghatározását. Ennek eredményét összevetve a már ugyancsak



említett foszfor-molibdénsavas denzitometrálas eredményeivel, csekély (0,01% nagyságrendű), de egyértelmű eltérés mutatkozott, ami azt jelezte, hogy az USP XXIII vékonyréteg-kromatográfiás rendszere nem eléggé szelektív: az ott észlelt folt alatt egy másik is van. Egy másik apoláris anyag jelenlétét szelektívebb VRK rendszer kidolgozásával és az említett HPLC módszerrel ki is lehet mutatni. Szerkezetét GC-MS módszerrel határoztuk meg: 13-etil-17 $\alpha$ -etinil-4-gonén-17-ol. Ennek a 3-deoxo-norgesztrelnak keletkezése az előadásom elején tárgyalt Birch-redukció ott bemutatott egyik mellékreakciója alapján értelmezhető. Mennyiségi mérése legcélszerűbben gáz-kromatográfiásan végezhető el. A két szennyezés mennyiségére HPLC, ill. gáz-kromatográfiás módszerrel nyert eredmények összege már jól egyezik a foszfor-molibdénsavas denzitometrálassal nyert értékkel, jelezvén azt, hogy a problémát nem kevesebb, mint tíz technika összehangolt alkalmazásával sikerült megoldani.

#### IV.

A Menuhin-effektus bevezetése és illusztrálása után szeretném bevezetni a *Menuhin-Kasziparov-effektust* is. Kasziparov, a sakkbajnok úgy került bele ebbe a képbe, hogy ő is, mint az élsakkozók általában, rengeteg szimultán partit játszik. A gyógyszer-analitikus-karmester élete, munkája ehhez hasonlóan szimultán „partik” sorozatából áll, hiszen általában az előzőekben ismertetett feladathoz hasonló további 6–8 feladattal kell egyidejűleg foglalkoznia. A zenekari analógiánál maradva, ez kb. annyit jelent, mintha a karmesternek ugyanazokkal a zenészekkel és hangszerekkel 6–8 zeneművet nem egymást követően, hanem szimultán kellene eljátszania, ami nem kis nehézséget jelentene mind a karmester, mind a zenész számára. Ha ehhez hozzávesszük azt, hogy egy ipari munkahelyen az időtényezőnek, pontosabban a határidőtényezőnek is komoly szerepe van, ez még csak növeli a nehézségeket. Ismét visszatérve a zenekari analógiához, ez olyan, mintha a szimultán előadott 6–8 zenemű előadásához rendelkezésre álló idő korlátozva lenne pl. fél órára. Ez olyan zeneművek esetén, mint pl. egy Bach: *Brandenburgi verseny* vagy egy Mozart: *Symphonia concertante* újabb, extra problémát már nem jelent az előadók számára, de ha a zeneművek között olyanok is vannak, mint pl. Bruckner *VII. szimfóniája* vagy Wagner: *Istenek alkonya* című zenedrámája, akkor a nehézségek hatványozódnak.

A vázolt nehézségekért azonban bőségesen kárpótol a problémák megoldása kapcsán érzett elégedettség és az ezekkel kapcsolatos intellektuális örömek. Remélem, hogy a felsorolt példák segítségével sikerült megértetnem Önökkel azt, hogy miért választottam előadásom címéül a *gyógyszer-analitika szépségeit*.



V.

Előadásom végére érve szeretnék *köszönetet mondani* mindazoknak, akik közvetlenül vagy közvetve hozzájárultak ahhoz, hogy ma ki tudtam állni Önök elé ennek a székfoglaló előadásnak megtartására. Az első csoportban azoknak mondok köszönetet, akik szakmai fejlődésem elősegítésével járultak hozzá eredményeimhez. Ezek közül elsőként édesapámra, *dr. Görög Dénes*re emlékezem, akiktől kisgyermek koromban a kémiai gondolkodás alapjait sajátítottam el. Kitűnő középiskolai kémia tanáraimról, *Diósy Ákos*ról és *Pauer István*ról való megemlékezés után azt szeretném elmondani, hogy egész tudományos pályámat meghatározó jelentőségű volt az a néhány év, amit a Szegedi Tudományegyetem *dr. Szabó Zoltán* akadémikus vezette Szervetlen és Analitikai Kémiai Intézetében *dr. Beck Mihály* diplomázójaként, majd disszertánsként töltöttem el. A Rich-terben a gyógyszer-analitika alapjait *dr. Nyiredy Szabolcstól* tanultam meg, gyógyszer-analitikus kutatóvá pedig a *dr. Gyenes István* mellett eltöltött évek alatt váltam. Amit ez alatt az idő alatt a gyógyszerkutatásról megtanultam, azt nagyrészt *dr. Fekete György*nek köszönhetem, itt azonban köszönetet szeretnék mondani nagyszámú nem analitikus kollégámnak is, akiktől a problémák közös megoldása során minden segítséget megkaptam, és akiktől igen sokat tanultam.

A második csoportban azoknak mondok köszönetet, akik a feltételeket biztosították munkámhoz, elsősorban *Pillich Lajos* elnök úrnak, aki a gyárba való belépésem napjától egészen a mai napig kitüntető figyelemmel kísérte fejlődésemet. Biztatása, segítsége nagyon sokat segített munkám során. Vezérigazgatói, illetve tudományos vezetői minőségben hosszú ideig élvezem *dr. Varga Edit* és *dr. Fekete György*, majd rövidebb ideig *Szolnoki József* és *Simonovits Emília* támogatását. Végül jelenlegi vezetőimnek, *Bogsch Erik* vezérigazgató úrnak és *dr. Vas Ádám* kutatási igazgató úrnak köszönöm meg azt, hogy tőlük munkám sikeres elvégzéséhez minden erkölcsi és anyagi támogatást megkapok.

Végezetül az itt ismertetett kísérleti munkában közvetlenül részt vevő munkatársaimnak mondok köszönetet lelkes, pontos, invenciózus munkájukért, ami nélkül ez az előadás nem születhetett volna meg. Először *Bihari Mária*, *dr. Csizér Éva*, *Herényi Bulcsu* és *dr. Szepesi Gábor* volt munkatársaim munkáját köszönöm meg. Köszönettel tartozom jelenlegi munkatársaimnak, akik az előadásomban szerephez jutott analitikai technikák kiváló művelői, így a *dr. Gazdag Mária* vezette Minőségfejlesztési Kutatólaboratórium munkatársainak (*Gilányiné Osztheimer Éva*, *Kemenesné dr. Bakos Piroksa*, *Mihályfi Katalin*, *Zsoldosné Babják Mónika*), a *dr. Horváth Péter* vezette Alkalmazott Fizikai-kémiai Kutatólaboratórium munkatársainak (*Dravecz Ferenc*, *dr. Halmos Zoltánné*, *Kerekesné dr. Lánczos Krisztina*, *Laukó Anna*, *Rényei Márta*, *dr. Trischler Ferenc*, *Varga Katalin*) és az

iff. dr. Szántay Csaba vezette Szerkezetkutatási Laboratórium munkatársainak (Balogh Gábor, Brlik János, Csehi Attila, Demeter Ádám, dr. Hegedüs Béla).

Neveik felsorolása nélkül köszönetet mondok a kísérleti munkában nagy szerepet vállaló technikus munkatársaimnak kitűnő munkájukért, kivételt téve közvetlen munkatársammal, Doktor Nándorné Etelkával, aki egyebek mellett az előadás ábraanyagának összeállításáért érdemel köszönetet.

## Irodalom

1. Görög S., Laukó A., Aranyi A., Balogh G., Halmos Zs.: *Abstract Book, 5th International Symposium on Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. Swedish Academy of Pharmaceutical Sciences, Stockholm, 1994. 10 p.
2. Görög S., Bihari M., Csizér É., Dravecz F., Gazdag M., Herényi B.: *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 14, 85 (1996).
3. Görög S., Balogh G., Gazdag M.: *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 9, 829 (1991).
4. Görög S., Gazdag M., Herényi B., Horváth P., Kemenes-Bakos P., Mihályfi K.: „The Role of Analytical Methods in Drug Development”. In D. Littlejohn, T. D. Thornburn-Burns (ed.) *Reviews on Analytical Chemistry*. The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 1994. 349–362.
5. Görög S., Gazdag M., Herényi B., Horváth P., Kemenes-Bakos P., Laukó A., Mihályfi K.: *Magy. Kém. Lapja*, 49, 409 (1994).
6. Görög S., Szász Gy.: *Analysis of Steroid Hormone Drugs*. Akadémiai Kiadó, Budapest – Elsevier, Amsterdam, 1978.
7. Görög S.: *Quantitative Analysis of Steroids*. Akadémiai Kiadó, Budapest – Elsevier, Amsterdam, 1982.
8. Görög S. (ed.): *Steroid Analysis in the Pharmaceutical Industry*. Ellis Horwood (Chichester) 1989.
9. a) Görög S.: *Spektrofotometriás gyógyszeranalízis*. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1994.  
b) Görög S.: *Ultraviolet-Visible Spectrophotometry in Pharmaceutical Analysis*. CRC Press (Boca Raton), 1995.
10. Görög S., Szepesi G.: *Z. Anal. Chem.*, 251, 303 (1970).
11. Görög S., Herényi B.: *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 8, 837 (1990).
12. Görög S., Tuba Z., Egyed, I.: *Analyst*, 94, 1044 (1969).
13. Görög S., Hajós Gy.: *J. Chromatogr.*, 43, 541 (1969).
14. Görög S., Szepesi G.: *Analyst*, 97, 519 (1972).
15. Görög S., Szepesi G.: *Analyt. Chem.*, 44, 1079 (1972).
16. Yoshitake, T., Hara, S., Yamaguchi, M., Nakamura, M., Ohkura, Y., Görög, S.: *J. Chromatogr.*, 489, 364 (1989).
17. Görög S.: *Analyt. Chem.*, 42, 560 (1972)
18. Görög S.: *Analyst*, 96, 437 (1971)
19. Görög S., Rényi M.: *Acta Chim. Hung.*, 115, 65 (1984).
20. Görög S., Laukó A., Rényi M., Hegedüs B.: *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 1, 497 (1983).
21. Görög S., Tuba Z.: *Analyst*, 97, 523 (1972).
22. Görög S., Herényi B., Löw M.: *J. Chromatogr.*, 353, 417 (1986).
23. Görög S., Gazdag M.: *J. Chromatogr. Biomed. Appl.*, 659, 51 (1994).
24. Görög S., Gazdag M., Kemenes-Bakos, P.: *J. Pharm. Biomed. Anal.*, 14, 1115 (1996).
25. Gazdag M., Babják M., Kemenes-Bakos P., Görög S.: *J. Chromatogr.*, 550, 639 (1991).
26. Görög S., Herényi B.: *J. Chromatogr.*, 400, 177 (1987).







Kálmán Alajos

az MTA levelező tagja

# BARANGOLÁSOK KRISTÁLYRÁCSOKBAN

In memoriam Náray-Szabó István

Elhangzott 1996. február 20-án

székfoglaló A. Alajos Kálmán

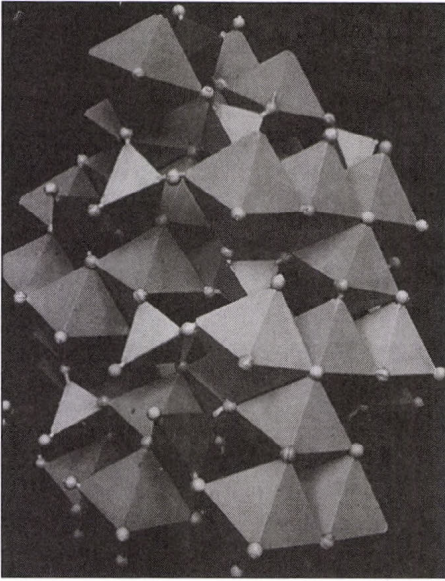
A. Alajos Kálmán székfoglaló

„Árnyéka az elköltözöttnek, sírod  
felett zeng az engesztelő szózat!”

A Kölcsény-idézet nem véletlenül hangzott el ajkamról! Székfoglaló előadásomat mesteremnek, Náray-Szabó István emlékének kívánom szentelni, akit az osztály 50 éve, 1945-ben választott meg levelező tagjának, két évvel később azonban „a köztársaság elleni összeesküvés” vádjával ártatlanul négy év börtönbüntetésre ítélték, és megfosztottak akadémiai tagságától. Az internálásal folytatódó évek után Schay Géza akadémikus meghívására 1957-től 1972-ben bekövetkezett haláláig a Központi Kémiai Kutató Intézet munkatársa. Életében elégtételt nem kapott, politikai rehabilitálását csak a rendszerváltás hozta meg. Visszanyerte akadémiai tagságát, majd az osztály felterjesztésére 1990-ben posztumusz Széchenyi-díjat kapott. A kémiai krisztallográfia kialakulásában betöltött úttörő szerepének az azt megillető méltatása még nem történt meg. Székfoglaló előadásom ennek a kezdete szeretne lenni.

Ha Náray-Szabó jelentőségét a kristálykémia úttörői között egy mondattal akarjuk jellemezni, akkor a monoklin, gyakran keresztalakzatban növekedő alumíniumszilikát, a *staurolit* 1929-ben általa meghatározott bonyolult szerkezetét [1] célszerű megemlítenem (1. ábra). E térrács értelmezése során ugyanis

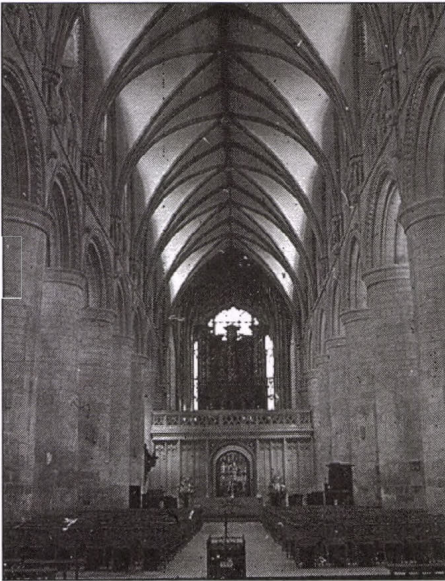




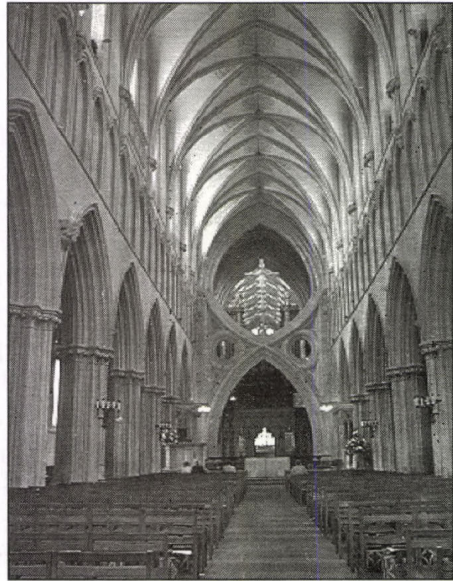
1. ábra. A staurolit nevű alumínium-szilikát kristályszerkezete



2. ábra. A tewkesburyi apátság román hajója

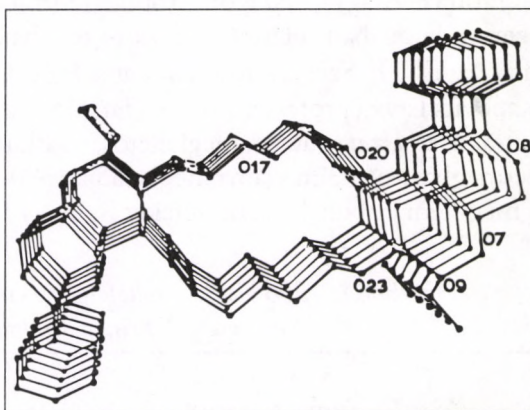


3. ábra. A gloucesteri katedrális román hajója

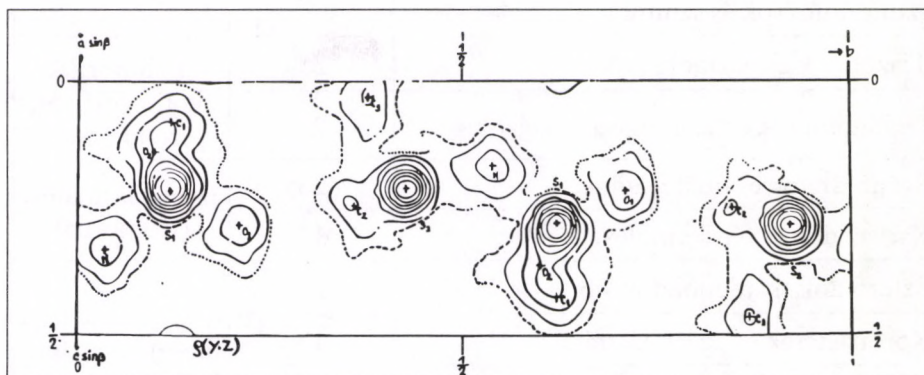


4. ábra. A wellsi katedrális kora gótikus hajója

felismeri, hogy abban mint rész az egészben benne foglaltatik az ugyancsak általa meghatározott *kianit* ( $\text{Al}_2\text{SiO}_5$ ) szerkezete [2]. A szilikátszerkezetek közötti összefüggés felismerésének jelentőségét napjainkban a fehérjeszerkezetek *genetikus* összefüggéseinek értelmezésénél mérhetjük fel igazán! Hogy példám érthetőbbé tegyem, figyelmükbe ajánlom a rózsák háborújában szerepet játszó tewkesburyi apátság (2. ábra) és a közeli gloucesteri katedrális (3. ábra) súlyos normann-román oszlopai közötti hasonlóságot. A kristályok ugyanis a természet alkotta bonyolult, háromdimenziós katedrálisoknak tekinthetők, ezen belül a Náray-Szabó által is tanulmányozott szervesetlen kristályszerkezetek modelljeit a román katedrálisokhoz hasonlíthatjuk. Az általam harminc év óta vizsgált szerves molekulakristályok modelljei inkább a légiesebb gótikus katedrálisokra hasonlítanak (4. ábra). Mind a katedrálisokat (bár legfeljebb két dimenzióban: hossz- és kereszt-ház), mind a kristályokat a *transzláció* (5. ábra) hozza létre. Csak míg a katedrálisokban a transzlációk száma 10-es, addig a kristályokban milliós nagyságrendű. Azonban transzláció nélkül nem-



5. ábra. Egy kétfogású  $C_2$  szimmetriatengely körül elhelyezkedő, 18 tagú koronaéter-molekula transzlációja a kristályrácsban



6. ábra. Az *S,S*-dimetil-*N*-mezilszulfilimin kristályszerkezetének az a tengelyre merőleges, kétdimenziós Fourier-szintézise



igen épült fel középkori katedrális. Transzláció nélkül nincs kristályrács, nincs szupermolekula és szupramolekuláris kémia.

Különös véletlen, hogy éppen harminc éve, 1966. február 20-án készült el Parmában a monoklin S,S-dimetil-N-mezilszulfilimin kristályról a második Fourier-szintézisem (6. ábra), melyből életem első szerves molekulájának szerkezetét kiolvashattam. A két nagy maximum – két kénatom – között jól látható a hidat képező nitrogén, balról két elkentebb folt a két metil-szén, míg jobbról egy oxigén ismerhető fel. Mellette egy nagyobb folt a másik oxigén, és a mezil-csoport szenének átlapolása látható. Ez a szerkezetmeghatározás [3] indította el Magyarországon a röntgendiffrakció szisztematikus alkalmazását a szerves kémiában. Három évtizedre meghatározta gyümölcösöző kapcsolatot az ELTE Szerves Kémiai Tanszékével, különösen Kucsman Árpád és Kapovits István professzorokkal. Harminc év alatt a tempó felgyorsult, s amint azt az 1. táblázat mutatja, meglehetősen különböző témákból publikált szerkezetmeghatározásaim száma meghaladja a 320-at, sőt a 350-et is, ha beszámítom a még nem publikált szerkezeteket is.

1. táblázat

*Az 1966 és 1996 között meghatározott kristályszerkezetek fő csoportjai és a vizsgált krisztallográfiai problémák*

Témacsoportok:	A szerkezetek száma	Krisztallográfiai problémák
Imidazolok, triazolok, oxazinok,....:	82	sztereoizoméria és tautoméria
Szulfidok, szulfoxidok, szulfimineket, szulfónium sók és szulfuránok:	68	
Tiazolinok és tiazinok:	39	polimorfia (konformációs, pszeudo- stb.)
Izokinolin- és vinkamin-származékok:	25	
Szénhidrátok és nukleozidok:	28	izostrukturális (izomorfia)
Karbazidok és fémkomplexeik:	14	
Szteroidok (kardenolidok stb.) :	24	molekuláris rendezetlenségek és gyűrűkonformációk vizsgálata
Koronaéterek és egyéb klatrátok:	12	
Egyéb S- és P-, továbbá Si- stb. vegyületek:	13	
Egyéb heterociklusos vegyületek:	15	



Miről beszéljek tehát Önöknek? Szinte bármelyik témacsoport lehetne előadásom gerince, de félek, hogy így túlságosan egyoldalú és unalmas lenne. Lehet, hogy a legújabb kutatásaimról, az *izostrukturalitás* jelenségének feltárásáról kéne beszélnem? Nos, egy éve az osztály zárt ülésén erről beszámoltam, s nincs okom, hogy ismételjem magamat. Remélem, hogy az izostrukturalitásról, a közelmúltban elért meglepő eredményeink birtokában s azok teljes feldolgozása után, megfelelő idő elteltével a tisztelt osztály előtt majd ismét beszámolhatok. Ezért, egy kedves hasonlatot kölcsönözve a székfoglalóját januárban tartó Görög Sándor tagtársamtól, magamat csupán egy kamarazenekar, maximum egy kvartett első hegedűsének tekintve, egy a mai napra komponált szonettel kívánok kedveskedni Önöknek.

Az *első tétel* – Náray-Szabó emlékére – „A tetraéderen táncolva” címet viseli. Bemutatom a közösen megoldott  $K_2Pb_2Si_2O_7$  szerkezetét [4], majd folytatom a D. W. J. Cruickshank (UMIST, Manchester) asszisztenseként meghatározott tetraéderes oxianionok szerkezetével. A tételt ezekből a vizsgálatokból az egész periódusos rendszerre érvényesnek talált törvényszerűségnek a levezetésével zárom le.

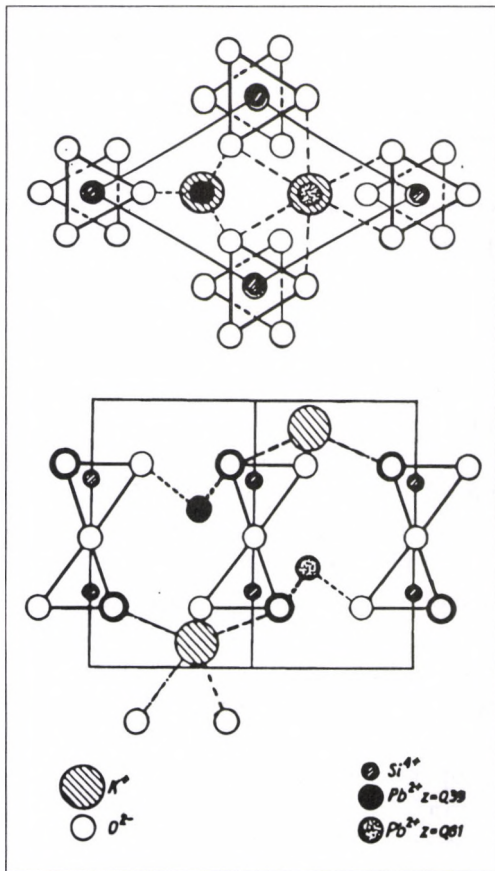
A *második tétel* „Az S-X bond bővületében” címet viseli, természetesen a „bond” nem a ma annyira divatos angломánia jegyében, hanem az alliteráció kedvéért íródott. Egy a szerves kémiában fontos  $S(VI)[O,O,N,C]$  tetraéderhez jutunk, ha a szulfát-anion két oxigénjét nitrogén-szén párossal helyettesítjük. Természetesen ezt a rendszert az  $\langle X-O \rangle$  átlagkötéshosszal már nem jellemezhetjük, másféle leírásmódot kell találnunk. A háromféle kötéstípus összehasonlíthatóságának alapja az lehet, hogy van-e közöttük konjugáció [5], vagy csupán kumulált kötéseknek tekinthetők. A végső választ harminc év elteltével az elmúlt hónapokban sikerült megadni. Egy további topológiai kísérlettel az analóg  $S(VI)[O,O,C,C]$  tetraéderből eljutunk a „hipervalens kötéssel” fémjelzett szulfuránokhoz, majd azok átrendeződésének kiváltásával átlépünk az intra-, s végül az intermolekuláris nemkötött  $S \cdots O$  kölcsönhatások meglehetősen széles tartományába.

A *harmadik tétel* az intermolekuláris kölcsönhatások világában próbál kalauzolni bennünket. Címe, „A kristályrács rabságában”, arra figyelmeztet, hogy minden *intramolekuláris* megállapítás a translációk és más szimmetriaműveletek eredményeképpen lényegében a szupermolekulát jelentő molekulatársulásban nyer végső értelmet, akár mérhető az elszenvedett változás, akár nem. A cím azt is jelzi, hogy az előadó a maga életét is már csak ebben a rabságban tudja elképzelni. Maradék időmtől függően néhány sajátos molekulatársulási formát, illetve jelenséget szeretnék bemutatni, amelyek a modern krisztallográfia tárgykörébe tartoznak.

## A tetraéderen táncolva

Náray-Szabó az üvegek fizikai sajátosságait tanulmányozva [6], a  $K_2Pb_2Si_2O_7$  szerkezetének tisztázásával az ólomüvegekben kialakuló szilikát-ólom-kapcsolatokat akarta felderíteni. A  $910^\circ\text{C}$ -on kongruensen olvadó diszilikát előállítás és pordiffrakciós vizsgálata [7] az irodalomból ismert volt. Az elemi cella hexagonális, és benne csak egy mól  $K_2Pb_2Si_2O_7$  van. Mivel az oszcillációs felvételek kioltást nem mutattak, Náray-Szabó a lehetséges tércsoportok számát 16-ra redukálta. Mivel piezoelektromosságot nem tudtunk mérni, kizárta a szimmetriacentrum nélküli tércsoportokat is. Kollineáris Si-O-Si csoportot tételezett fel, melynek középebe szimmetriacentrumot rendelt. Így már csak

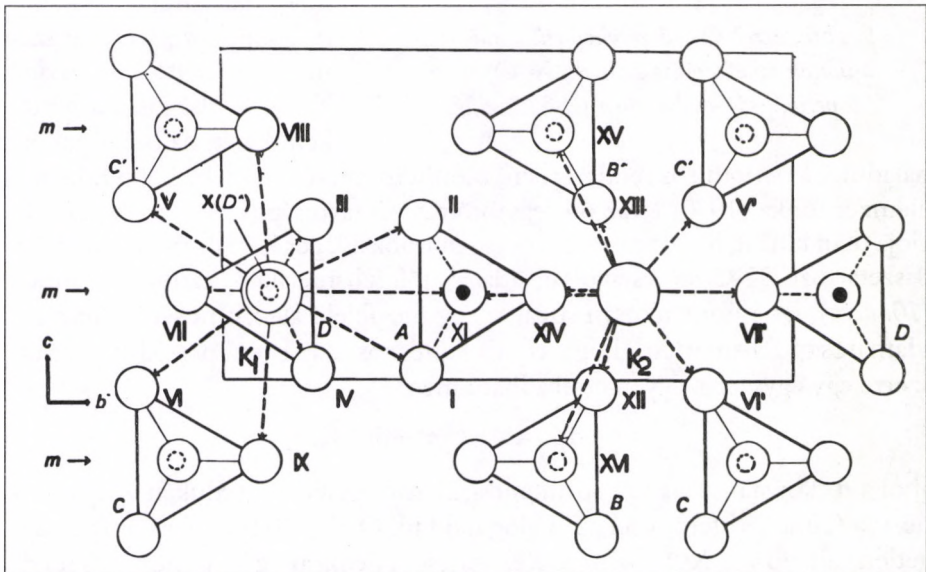
három tércsoport maradt, melyből a  $P\bar{3}$  alkalmas volt a szerkezet ellentmondásmentes értelmezésére. A diszilikát-csoportot a  $c$  tengelyre mint cellaélre ültette, úgy, hogy a hídoxigén a szimmetriacentrumba került, a Si-atomok pedig ettől az oxigéntől  $\pm 1,61 \text{ \AA}$ -re ülnek a  $c$  tengelyen. Az  $Pb^{2+}$ - és  $K^+$ -ionok a háromfokású tengelyen foglalnak helyet (7. ábra). Feladatomban az általam előállított kristályról készített oszcillációs felvételek reflexióinak kimérése, majd a kapott intenzitásokról ennek a szerkezetnek az igazolása volt. Meg kellett határoznom a még ismeretlen atomi helykoordinátákat, azaz az általános helyzetű hat oxigén koordinátáját, valamint a  $Pb^{2+}$  és  $K^+$   $z$  koordinátáit. A munka során első ízben számítottam Beever-Lipson-szalagokkal egydimenziós elektronsűrűség-eloszlást igen jó eredménnyel. Philips-pordiffraktométerrel mért reflexiókkal a modelt némileg már finomítani is



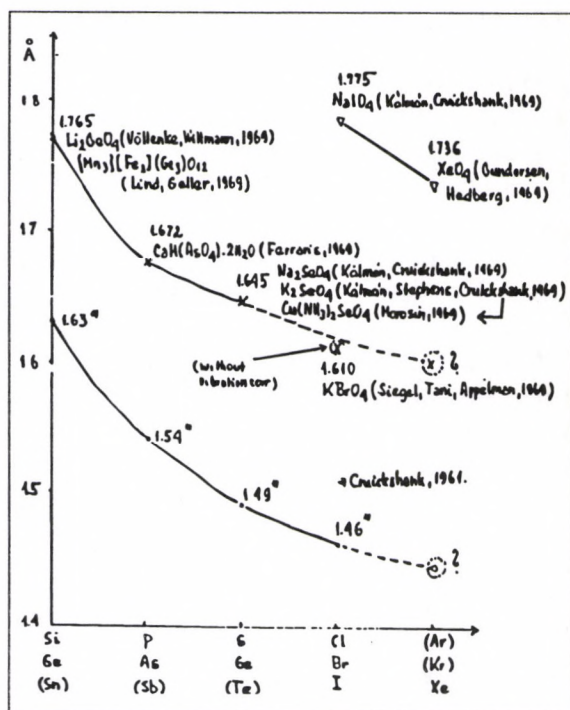
7. ábra. A  $K_2Pb_2Si_2O_7$  rétegszilikát a és c tengelyre merőleges vetületei



tudtam. A bizonyított szerkezettel Náray-Szabó értelmezni tudta az  $\text{SiO}_4$  tetraéderek és a  $\text{PbO}_3$  trigonális piramisok között kialakuló végtelen kiterjedésű síkokat, amelyek magyarázták a kristályok bázislap szerinti jó hasadását is. Munkánk hamarosan külföldön is figyelmet keltett, pl. W. Eitel *Silicate Science* című monográfiájában [8] a diszilikátok szerkezetét ezzel reprezentálja. Később meghatározták a vele izotíp digermanát ( $\text{K}_2\text{Pb}_2\text{Ge}_2\text{O}_7$ ) szerkezetét [9], ami a Liebau által felvetett [10], az önkényes szimmetriacentrum kijelöléséből származó kétséget is eloszlatta. Mindez érdeklődésemet az akkor már számos laboratóriumban folyó tetraédes oxianion-kutatásokra tereli, s elvezet Cruickshank manchesteri laboratóriumaiba (1968). Cruickshank a tetraédes oxianionok térszerkezetére vonatkozó elméletét 1961-ben állította fel [11], elsősorban a periódusos rendszer második sorára ( $\text{Cl} \rightarrow \text{Si}$ ) vonatkozó kísérleti eredmények alapján. A harmadik és a negyedik sor elemei által képzett tetraédes oxianionok (beleértve az átmeneti fémek alkotta formákat is) pontos szerkezetmeghatározása azonban még az 1960-as évek végén is hiányos volt. Ezért kezdtem a  $\text{K}_2\text{SeO}_4$  és a  $\text{NaIO}_4$  szerkezetmeghatározásával, illetve finomításával foglalkozni. A metaperjodát szerkezete ismert volt, a  $\text{K}_2\text{SeO}_4$  modelljét pedig az izotíp  $\beta\text{-K}_2\text{SO}_4$  és  $\text{K}_2\text{CrO}_4$  koordinátáinak átlagolásából állítottam fel (8. ábra). Munkám célja az általam igen pontosan mért adatokból megfelelően választott töltésű és komplex formájú atomi szórástényezőkkel



8. ábra. A  $\text{K}_2\text{SeO}_4$  szerkezetének az a tengelyre merőleges vetülete



9. ábra. Az XO<sub>4</sub><sup>n-</sup> összegképletű tetraéderek oxianionok átlagkötéshosszáinak (X-O) eloszlása a periódusos rendszerben (első közelítés)

haladunk a periódusos rendszerben, monotonon csökkennek. Több hónapos elemzőmunka (1970) és az összegyűjtött X-O távolságok hőmozgás korrekciója után kitűnt, hogy a tetraéderek oxianionok átlagos kötéshossza (azaz négy összetartozó X-O kötéstávolság átlaga) jól felismerhető harmóniát mutat (10. ábra). Ez automatikusan sugallta egy megfelelő algoritmus alkalmazását. Hamarosan felismertem, hogy az átlagkötéshossz az egész periódusos rendszerre egy egyszerű egyenlettel adható meg:

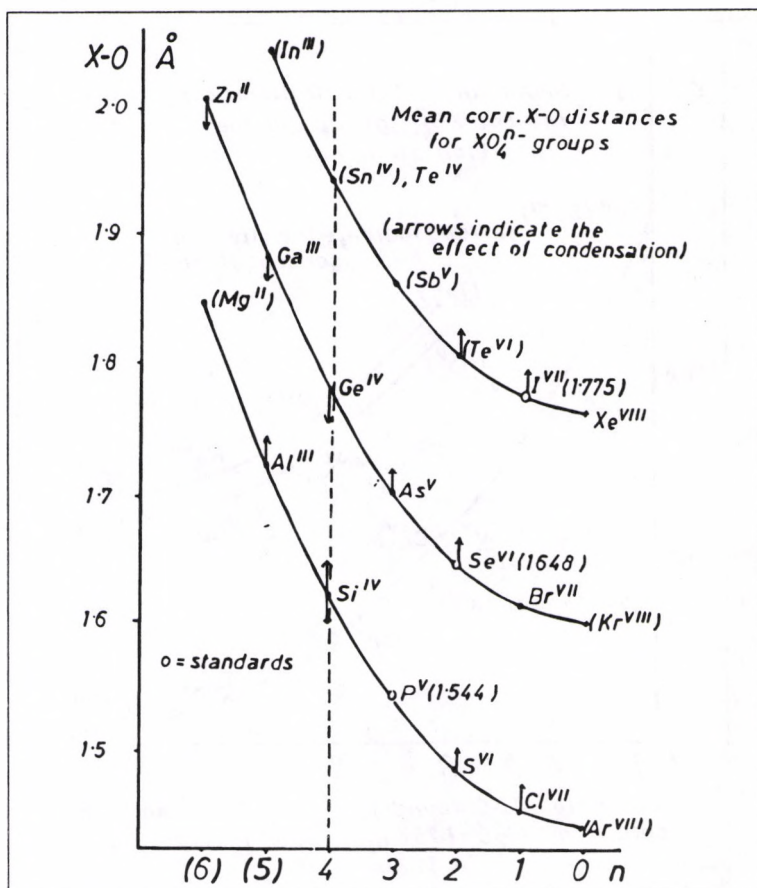
$$d(X-O) = k \cdot n^2 + d_0,$$

ahol a  $d_0$  konstans az adott sor nemesgáz-konfigurációra redukált átlagkötéshossza (átmeneti fémeknél az analóg oxid pl. OsO<sub>4</sub> középértéke), míg a független változó  $n$  az XO<sub>4</sub><sup>n-</sup> tetraéderek töltése,  $k$  pedig az egész periódusos rendszerre érvényes empirikus (0,0113) állandó [18]. Kondenzált tetraédereknél  $n$  a töltés és a kovalens kötések számának összege. Természetesen felmerült a

meghatározni a tetraéderek geometriáját, figyelembe véve az atomi vibrációk hatását is. Lefinomítottam még a Na<sub>2</sub>SeO<sub>4</sub> szerkezetét is, amit Argay Gyula Náray-Szabó irányításával határozott meg [12].

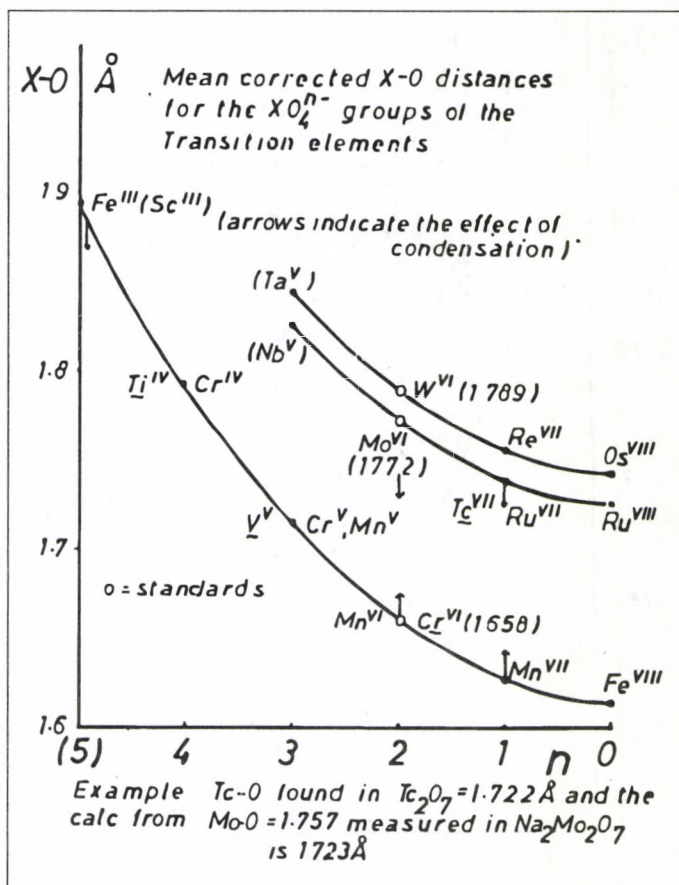
Hazatérésem után eredményeimet [13–15] megpróbáltam korrelációba hozni az irodalomból akkor összegyűjthető legérdekesebb adatokkal, pl. a KBrO<sub>4</sub> [16] és a XeO<sub>4</sub> [17] szerkezetével. Egybevetésükre legalkalmasabb a periódusos rendszer sor és oszlop szerinti követése volt (9. ábra). Cruickshank híres dolgozatában [11] közli a második sor elemeire számított közelítő pontosságú X-O távolságok átlagértékeit. Ezek, ha balról jobbra





10. ábra. Az  $XO_4^{n-}$  összegképletű tetraédres oxianionok átlagkötéshosszának  $\langle X-O \rangle$  eloszlása a periódusos rendszerben a hőmozgás korrekciója után. Az ábrán csak a fősorok elemei láthatók

kérdés,  $n$  valóban a csoport töltése, s nem csupán az oszlop számából ( $m$ ) származtatható (pl.  $n=8-m$ ) mennyiség? Erre egyértelmű választ az átmeneti fémek képezte tetraédres oxianionok (11. ábra) adtak. Ha ránézünk a permanganát, a manganát és a hipomanganát képezte tetraéderek átlagkötéshosszának helyére, kitűnik, hogy az csak a töltésükkel, egy, kettő, illetve három értelmezhető. Felismerésem előtt ilyen jelenséget körülményesen (pl. elektronperturbáció feltételezésével) próbálták magyarázni. Náray-Szabó életének utolsó évében atyai gondossággal segített újabb és újabb szerkezetek felkutatásában,



11. ábra. Az  $XO_4^{n-}$  összegképletű, az átmeneti fémek által képzett tetraédres oxianionok átlagkötéshosszáinak  $\langle X-O \rangle$  eloszlása a periódusos rendszerben a hőmozgás korrekciója után

amelyek az egyenlet alkalmazhatóságát igazolták. Lezárva korai kutatásaim felvillantását, elmondhatom, hogy az eredmény kedvező nemzetközi értékelést kapott. Bastiansen, Linnett, Pauling és még sokan gratuláltak, míg pl. Güdel és Ballhausen [19] a spektroszkópiai vizsgálataikhoz egyenletemmel számoltak ki hiányzó  $\langle X-O \rangle$  átlagtávolságokat.

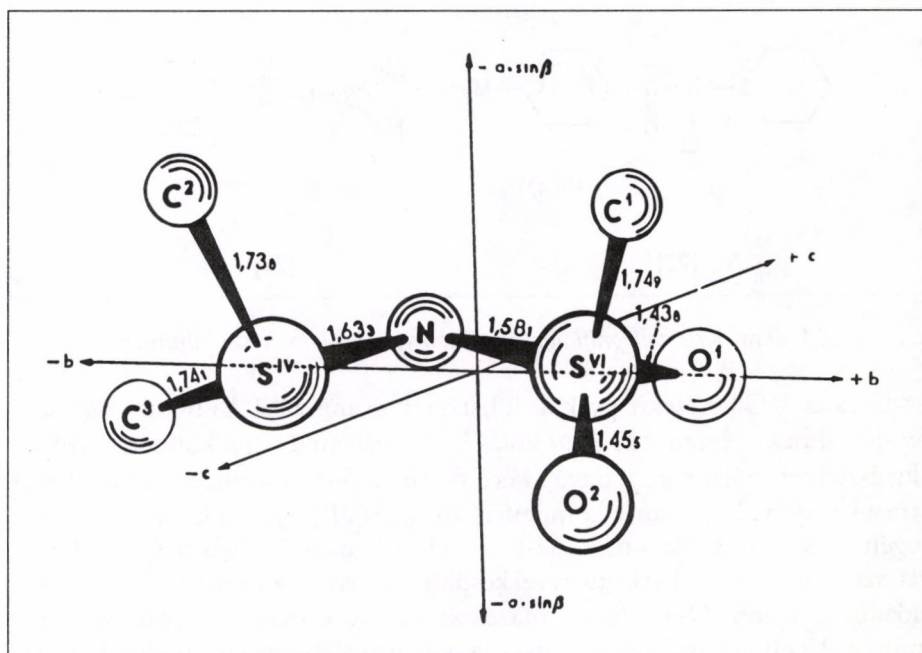
E témakörből több előadást is tartottam Észak-Amerika (Hamilton, Minneapolis, Blacksburg) és Európa (Manchester, Berlin, Giessen, Torino) egyetemén.



## Az S–X bond bővületében

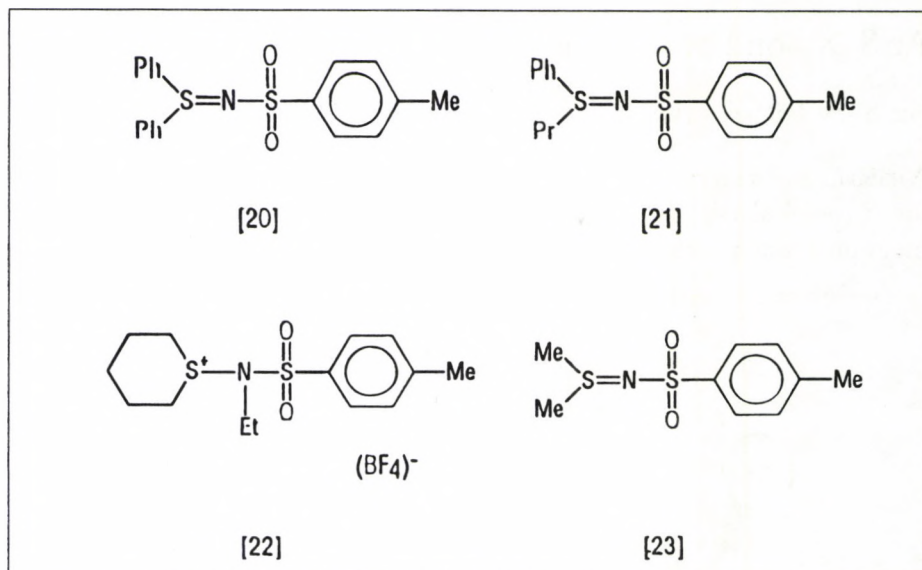
### Az S–N kötések titkai

A második tétel a szerves kémiai kutatásokban pályámat elindító kis mezilszulfilimin molekulából (12. ábra) vezethető le. Szerkezete több szempontból is megváltoztatta a többszörös kötésekről kialakult gondolkodásmódot (1966).



12. ábra. Az *S,S*-dimetil-*N*-mezilszulfilimin szerkezetének klinografikus vetülete az atomtávolságokkal

Tudomásul kellett venni, hogy az  $S(IV)=N$  kettős kötés szignifikánsan hosszabb, mint az  $S(VI)-N$  egyes kötés. Ezt erősítette meg a Port Sunlightban (UK) elvégzett második [20], és a már itthon Sasvári Kálmánnal közösen elvégzett harmadik szulfonilszulfilimin-vizsgálatom [21] is. A  $(CH_3)_2S=N-SO_2CH_3$  publikálására [3] reagáló első dolgozatokban [22, 23] közölt szerkezetmeghatározásokból (13. ábra) Cameron és munkatársai megállapítják, hogy ha a nitrogénatomot alkilezzük, akkor az  $S(IV)-N-S(VI)$  rendszeren kialakult delokalizáció megváltozik, azaz az S–N távolság jelentősen megnő. Az akkori mérések pontossága mellett azonban nem volt kimutatható ennek az



13. ábra. Krisztallográfiailag tanulmányozott N-tosil-szulfiliminek

S=O és az S–C kötésekre gyakorolt hatása. Ugyanis a 0,1 Å (10 pm) nagyságrendű változást elszenvedő S–N kötés hatása három  $d\pi-p\pi$  kötésen oszlik el, alig észlelhető választ gerjesztve a két S=O és az S–C kötéshosszakban. Tehát arra a kérdésre, hogy van-e kompetíció [5] az S(VI)[O,O,N,C] csoport heterogén S–X kötései között, 1967-ben [24] sőt még 1975-ben sem lehetett választ adni [25]. Csak három évvel később, a Schawartz József által (Chinoin) előállított újabb N-mezil-származékok szerkezet-meghatározásakor [26] tudtam Párkányi László közreműködésével igen alacsony ( $R=0,761$ ) korrelációs koefficiens mellett bizonyos S–N/S–O-függést felismerni.

1981-ben Czugler Mátyás koronaéterből kristályosított szulfaguanidint. A remélt zárványkomplex (vagy a hagyományos monohidrát) helyett egy anhidroformát kapott, két eltérő konformációjú molekulával az aszimmetrikus egységben. Az egyik molekula rendhagyó konformációjának értelmezése, hazánkban először, a Cambridge Krisztallográfiai Adatbank felhasználásával történt [27]. A több mint 120 N-szubsztituált arilszulfonamid-csoport geometriájának elemzésével az S(VI)[O,O,N,C] tetraéderek számos finomszerkezeti és konformációs jellemzőjét ismertük fel. A legfontosabb eredmény a szulfonamidok és imidek lehetséges tautomeriájának egyértelmű eldönthetőségének bizonyítása volt az S–N kötéshosszak és az NSO kötésszögpar közötti összefüggések alapján.



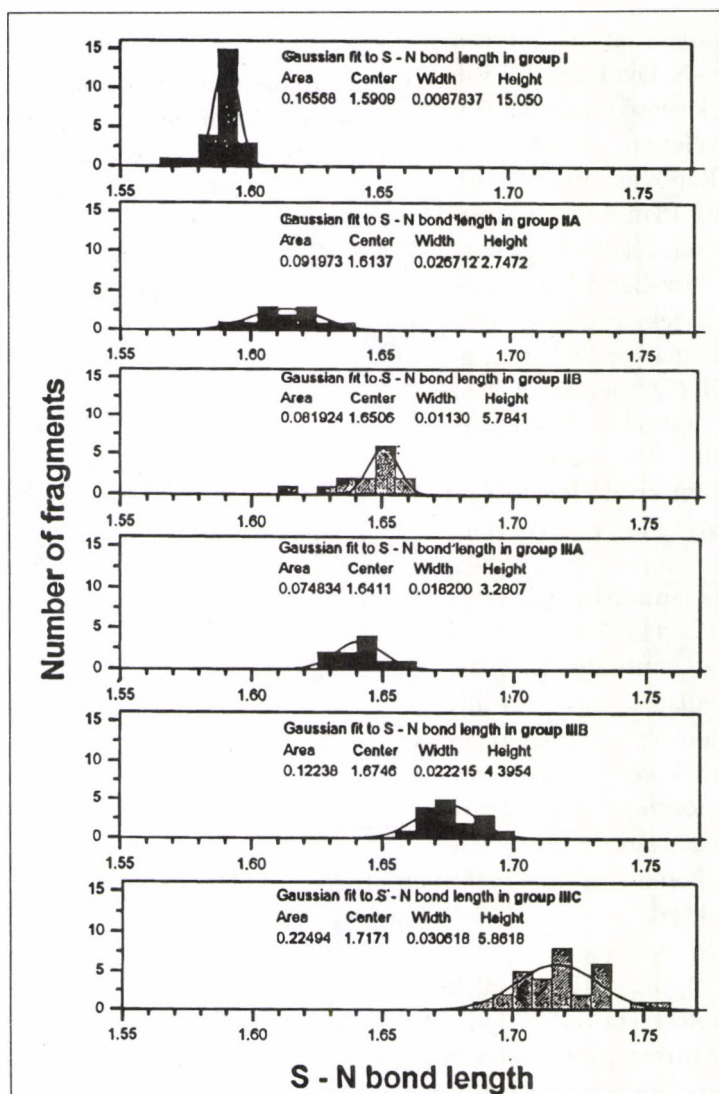
Az S=O és az S–C kötéshosszak S–N távolságoktól való függésének végső kimutatásában ismét a véletlen segített. 1994 végén a Kapovits-laborban egy szintézis váratlanul nem a kívánt kristályos terméket szolgáltatva. A kapott bisz-benzolszulfonilimid-származék, amit a 2. táblázatban alkalmazott általános formula jelöl (Q=negatív töltés), meglehetősen váratlan volt [28]. Szimmetrikus szerkezeténél fogva viszont kiváló lehetőséget nyújtott arra, hogy a centrális nitrogénre történő hatásokat *leszűkítve* tanulmányozhassuk. Bombicz Petra közreműködésével ismét a Cambridge Krisztallográfiai Adatbankhoz fordultam. Az elemzés a 2. táblázatban bemutatott kötéshosszak, szögek és torziósszögek szerint történt. 44 kristályszerkezetet talál-

tunk, melyben összesen 57 szimmetriafüggetlen C–SO<sub>2</sub>–NQ–SO<sub>2</sub>–C csoportot tudtunk kijelölni, majd a Q függvényében osztályozni. Az I. osztályba negatív töltésű nitrogént tartalmazó imidátok, a II. osztályba a nehézfémek, (pl. Hg, Ag), míg a III. osztályba a H-, Si-, C-, S-, O-atomok alkotta N–Q kovalens kötéssel bíró C–SO<sub>2</sub>–NQ–SO<sub>2</sub>–C csoportok kerültek. Az S–N–S csoport C<sub>2v</sub> szimmetriája Q elektronegativitásának növekedésével csökkent, de az SN/SN függvény irántangense igen magas korrelációs (R=0,986) koefficiens mellett egy. Ez azt jelenti, hogy 114 S–N kötés Q szerinti eloszlása megbízhatóan particionálható. Az eloszlásdiagramból (14. ábra) kitűnik, hogy a negatív töltéssel bíró csoportok S–N kötései 1,59 Å körül éles Gauss-eloszlású maximumot képeznek. A Hg-csoport fémek két alosztályt képeznek, egy nitrogénhez kötődve rövidebb, míg két nitrogénhez kötődve hosszabb S–N kötést generálnak. A III. osztály három alegységre bontható. Jól elkülönülnek hidrogénnel képzett szulfonamidok, majd a Q=szilícium/szén formálta alosztály következik, némileg átfedve az oxigéncsoport elemei által kiváltott leg-

2. táblázat

A bisz-benzolszulfonilimid-molekula konnektivitási diagramja az atomok számozásával és az azokból képzett kötések, szögek és torziós szögek számozásával

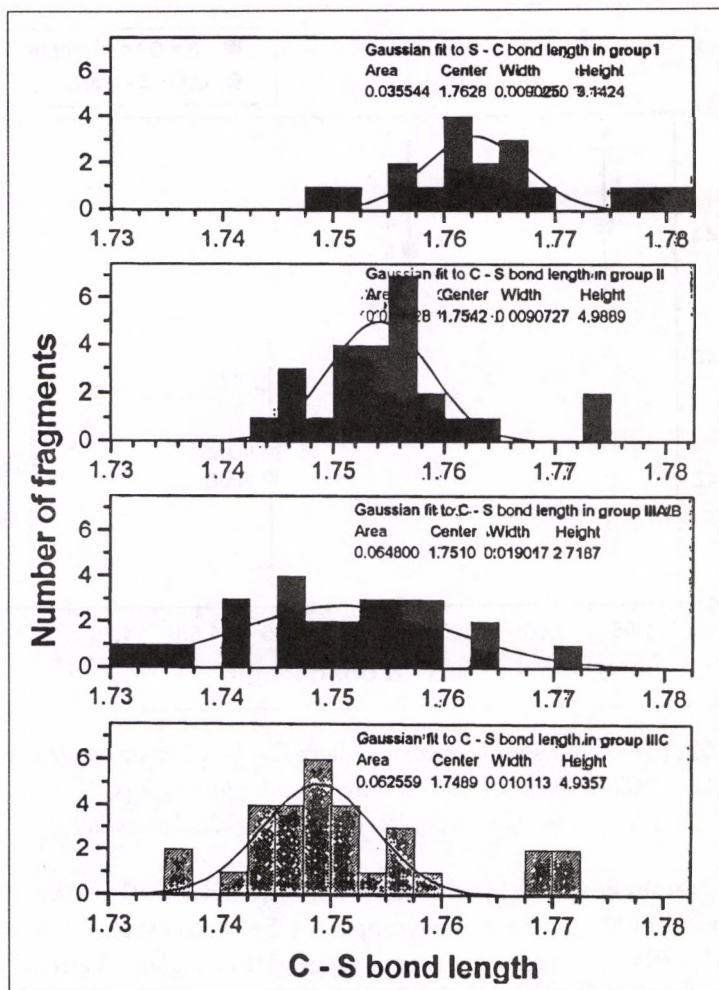
<b>Bond lengths:</b>	<b>Bond angles:</b>	<b>Torsion angles:</b>
B1: 12	A1: 214	T1: 4123
B2: 14	A2: 215	T2: 5123
B3: 15	A3: 218	T3: 8123
B4: 18	A4: 415	T4: 1236
B5: 23	A5: 418	T5: 1237
B6: 36	A6: 518	T6: 1239
B7: 37	A7: 123	
B8: 39	A8: 236	
	A9: 237	
	A10: 239	
	A11: 637	
	A12: 639	
	A13: 739	



14. ábra. A bisz-benzolszulfonilimidekben mért S-N kötéstávolságok (Å) eloszlása a nitrogénsubstitúens (Q) szerinti csoportosításban

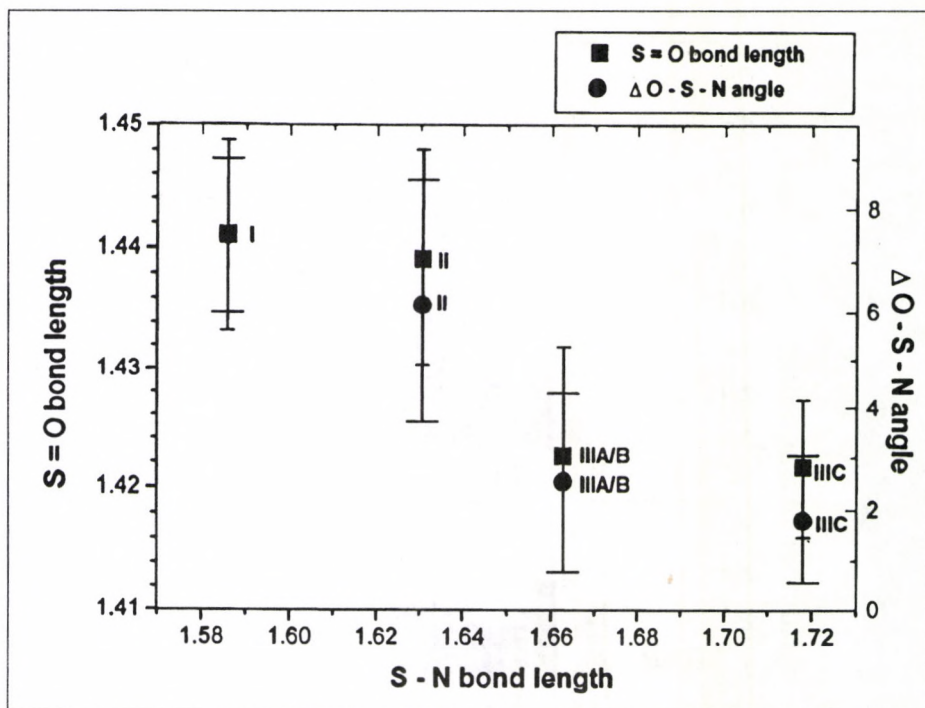
hosszabb S-N kötések markáns alosztályát. Ez az eloszlás majdnem két tized Ångström (20 pm) széles, azaz a S-N kötés Coulson-formulával becslött  $\pi$ -kötésrendje mintegy 0,4 egységet változik. A másik három kovalens kötésre





15. ábra. A bisz-benzolszulfonilimidekben mért S-C kötéstávolságok (Å) eloszlása a nitrogénszubsztituensek (Q) négy főcsoportja szerinti csoportosításban

tehát átlagosan 0,13–0,13  $\pi$ -kötésrendváltozás esik, ami csak egy-két század Ångström (1-2 pm) kötéshosszváltozást eredményezhet. Így most sem várható látványos változás az S-C és S=O kötéshosszakban. Szerencsére a 15. ábrán látható, hogy statisztikus érvényességgel az S-C kötések rövidülése csak néhány század Ångström. A particionálást itt négy egységre szűkítettük, mert nagyobb felbontás értelmetlen volna. Jól látható, hogy a rövidülés az ionos



16. ábra. Az  $\langle S-O \rangle$  átlagkötéshosszak ( $\text{\AA}$ ) és az  $O-S-N$  kötésszögkülönbségek ( $\Delta$ ) átlagértékének függése a nitrogénszubsztituensek ( $Q$ ) négy főcsoportjára számított  $\langle S-N \rangle$  átlagkötéshosszaktól

állapot és a fémes kötés között a legnagyobb, majd határozatlanná válik és lelassul. Most nézzük meg ezen négycsoportos  $S-N$  kötés particionálás-függvényében az  $\langle S=O \rangle$  átlagkötéshosszak reagálását (16. ábra). Látható, hogy az ionos állapotú és a fémes kötésű  $QN-SO_2C$  csoportok  $\langle S=O \rangle$  értékei között alig van változás, ám a fémes és a kovalens kötések között meredek zuhanást tapasztalunk. Utána az egyszeres  $\langle S-N \rangle$  kötéshosszak függvényében változás ismét alig észlelhető. Korábbi megállapításunkkal [27] összhangban ugyan-ezen ábrán látható, hogy az  $N-S-O$  kötésszögek különbsége a szulfonimideknél jelentős, átlagosan  $6-7^\circ$ , míg szulfonamidoknál  $2^\circ$  körüli értékre csökken, és szoros korrelációt mutat az  $\langle S=O \rangle$  kötéstávolságoknak az  $\langle S-N \rangle$  kötéshosszak függvényében mutatott változásával.

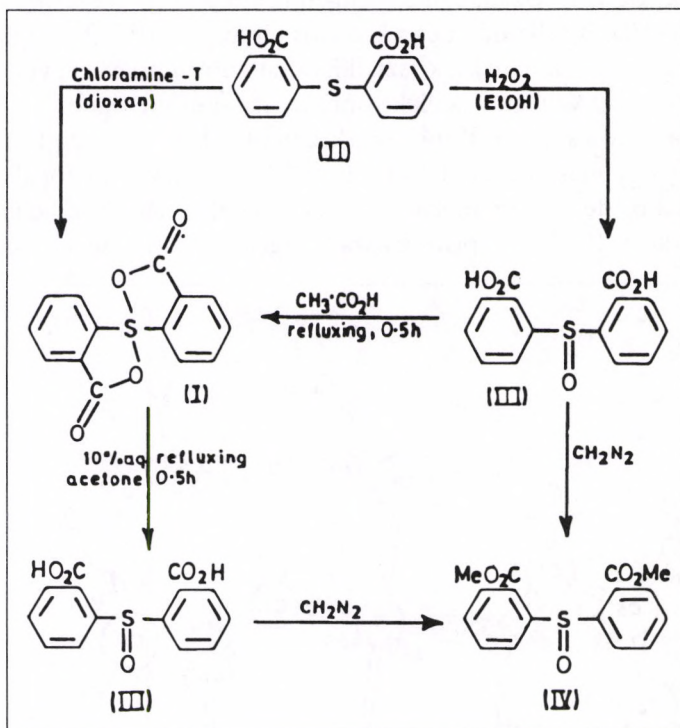
Konklúzió: Megcáfolva doktori értekezésem [25] egyik alapvető tézisét, 30 év elteltével kimondhattuk, hogy az adatbank szolgáltatta nagyszámú és a korábbiaknál lényegesen pontosabb adattal s azok statisztikus értékelésével



olyan kis változások is kimutathatók és korreláltathatók, amelyek a Jaffe-féle kompetícióelv [5] érvényességét igazolják. Napjainkban éppen ez a kristályszerkezetek egyre pontosabb újrvizsgálatának az egyik célja.

### Utazás az S–O kötések mentén

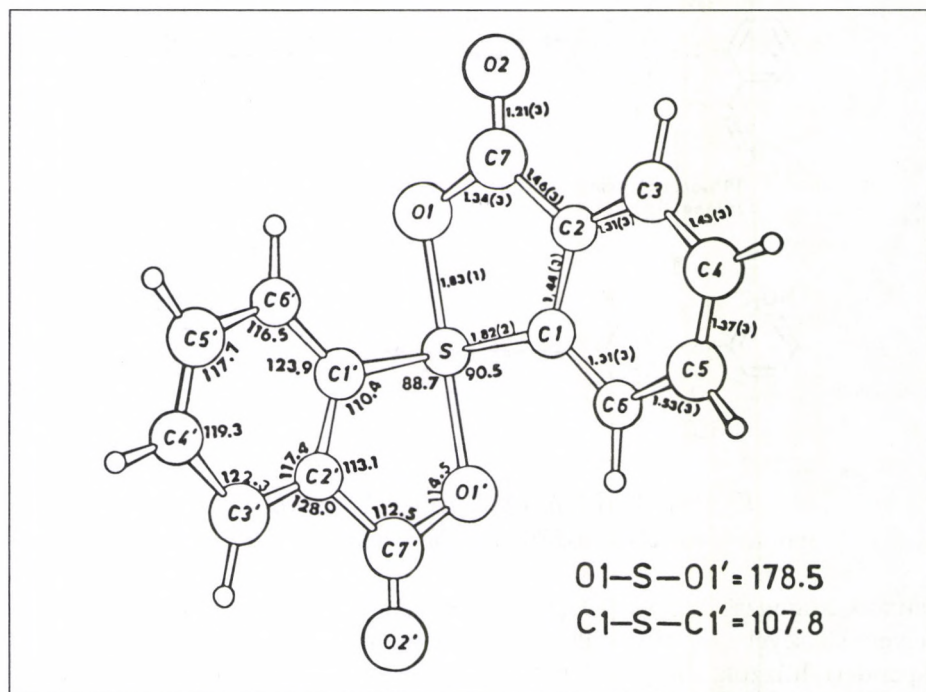
Eddig az S–N kötések változásával szemben mutatott rendkívül kis (század Ångström, azaz 10 pm nagyságrendű) S=O kötéshossz-reagálások kimutatásával foglalkoztunk. Most tegyünk egy nagyobb lépést. Gondolakisérletünk-



17. ábra. Az első, halogénatom jelenléte nélkül stabil spiroszulfurán előállításának mechanizmusa Kapovits I. szerint

ben az eddig vizsgált S(VI)[O,O,N,C] tetraédert a nitrogénnek szénnel való helyettesítésével egyszerűsítjük. Majd ragadjuk meg a két oxigént, és mint egy expandert, húzzuk, ahogy csak bírjuk, szegény visítani fog, amit feltehetően a 21. század molekulaakusztikai berendezései már mérni is fognak. Bizonyos megnyúlás után az S=O kettős kötések szétszakadnak, s egy magános elekt-

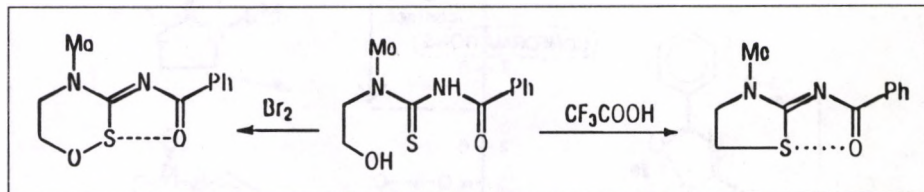
ronpár formálódásával a csökkent (VI→IV) vegyértékű kén körül egy trigonális bipiramisos atomelrendeződés alakul ki. Amikor a szimmetrikusan elért hossz már vagy két tized Ångströmmel (20 pm-rel) hosszabb, mint az elméletileg elfogadott S–O egyszeres kötés, a további szimmetrikus nyújtás igen nagy ellenállásba ütközik. Ez a háromcentrumos négyelektronos alakzat a J. I. Musher által 1969-ben bevezetett hipervalens kötés [29], amit a Musher által megálmodott molekula formájában először Kapovits István állított elő 25 éve. A szintézis útja a 17. ábrán látható. E molekula stabil létezése oly hihetetlennek tűnt, hogy csak az előzetes röntgendiffrakciós vizsgálataim alapján ítélték publikálhatónak. Ez volt hazánkban a röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározás első igazi diadala. A cellaméret és a különös tércsoport (Fdd2) meghatározása felfedte, hogy a molekulának a kristallográfiai szimmetriával egybeeső kétfogású ( $C_2$ ) tengelye van, ami az elektronegativitás-különbségek figyelembevételével eldöntötte a spiroszulfurán-szerkezetet [30]. A teljes szerkezetmeghatározás [31] úgy másfél évvel később fejeződött be, ami kutatópályám egyik legizgalmasabb, de sok személyes bukdácsolással is járó munkája volt. Az utóbbi az akkori (1972) igen primitív számítógépi környezettel magyarázható.



18. ábra. Az első stabil, halogénmentes spiroszulfurán térszerkezete



Az axiális és kollineáris O–S–O híd és a normális S–O egyes kötésnél 20 pm hosszabb kötések (18. ábra) igazolták Musher jóslatát. Újabb szulfuránok előállítása jó ideig nem folytatódott. Szerencsére eközben ismét történt egyik hazai szerves kémiai műhelyben valami szokatlan és izgató. Sólyom Sándor a GYOKI-ban brómozással végrehajtott gyűrűzárással (19. ábra) egy olyan új típus-

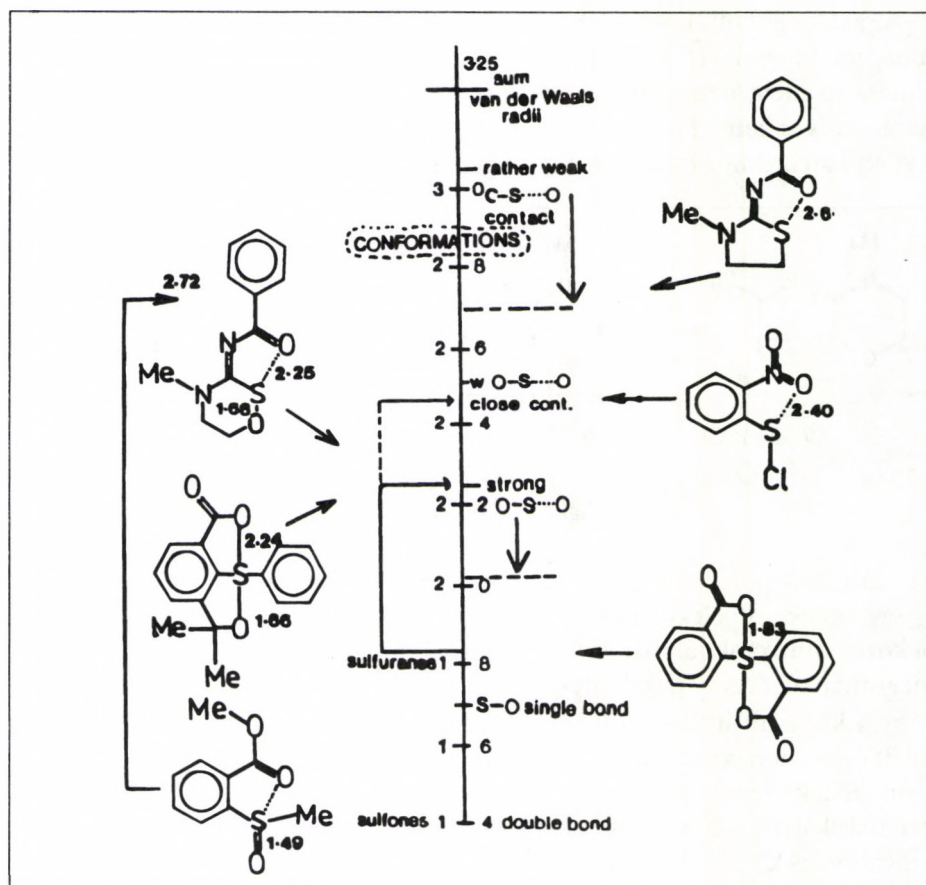


19. ábra. O–S···O és C–S···O háromcentrumos, kételektronos, nem kötött S···O kölcsönhatást mutató oxatiazin- és thiazolin-származékok szintézise  
Sólyom Sándor szerint

sú oxatiazin-molekulát szintetizált, melynek az IR spektrumából hiányzott a  $\nu_{\text{C=O}}$  sáv, megkérdőjelezve a vélt szerkezet helyességét. Sohár Pál barátom korábbi közös munkánkból már megtapasztalta a röntgendiffrakció ilyen esetekben megmutatkozó erejét, kristályszerkezet-meghatározást javasolt. Ez igazolta, hogy a kialakult háromcentrumos, kételektronos kvázi lineáris O–S···O híd miatt miért nem a várt helyen jelenik meg a karbonilsáv [32]. A mellékreakció termékének szerkezetfelderítése [33] pedig azt igazolta, hogy a vízelvonással járó másik gyűrűzárás ugrásszerűen legyengíti az S···O kölcsönhatást, ugyanis a továbbra is közel lineáris C–S···O elrendezésben most a kisebb elektronegativitású szén a hídfőatom.

Ha mindezeket a szulfonok  $\approx 1,4$  Å kötéshosszával induló skálán ábrázoljuk, melynek a felső vége a kén és az oxigén Van der Waals-rádiuszának összege (3,25 Å), egy sajátos eloszlást kapunk (20. ábra). A skálán bemutatok az eddig megismert molekulákon kívül az 1970-es évek végén ismét beindult Kapovits-féle gépezet előállította új molekulák szerkezetéből is néhányat (teljes taglalásuk egy önálló előadásban is alig férne el), jelezve, hogy ilyen vagy olyan karakterrel lassan minden pikométerre esik egy-egy új S–O távolság.

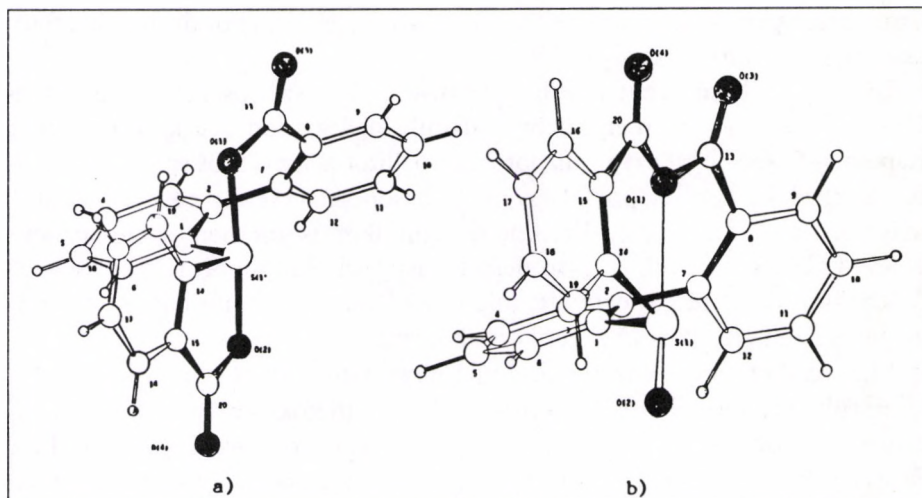
A szulfidok, szulfoxidok stb. kórushangversenye [34–37] után újabb áttörés 1988 táján következett be. A Sólyom Sándor oxatiazinjában [32] felderített háromcentrumos-kételektronos O–S···O kölcsönhatás és az irodalomból vett aszimmetrikus szulfurán [38] közötti hiányzó kapocs Kapovits István műhelyében a Livant-féle klórszulfuránok módosításával [39] született meg. Azután reánk zúdult a szulfuránanalóg szulfóniumsók hada [40, 41], melyeknek szer-



20. ábra. Az S-O kötéstávolságok eloszlása a szulfonokban mért (1,4 Å) értékektől a Van der Waals-rádiuszok (3,25 Å) összegéig

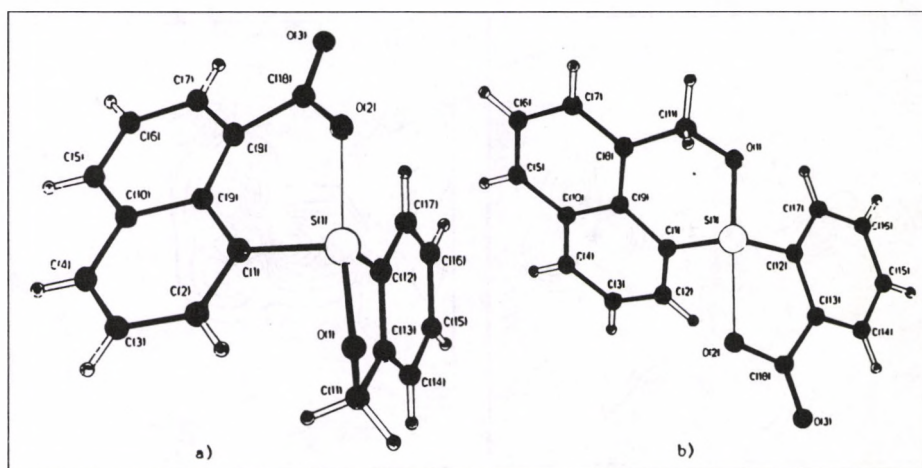
kezetfelderítése tovább gazdagította a skálát. A szférák zenéjét a szimmetrikus és aszimmetrikus spiroszulfuránok [42] „angyalserege” hozta. Egy arkangyal is megirigyelhetné az öt-, hat-, illetve héttagú (21/a ábra) laktongyűrűk képezte szulfuránszárnyakat. Most szentségtörő módon tépjük szét a 21/a ábrán látható héttagú gyűrűt. Folyamatosan nyújtva az S-O kötet, az hamarosan elpattan, és ezt követi egy másik szakadás is az alsó  $\gamma$ -laktongyűrű éterkötésénél. Kialakul egy szulfoxidcsoport, majd a két szabad kötés vég egy tíztágú gyűrű zárásával a kiindulási szulfuránnal izomer savanhidridet képez (21/b ábra). A szimmetrikus hipervalens kötéspár (1,86–1,86 Å) egyrészt 2,66 Å hosszúságú nem kötött S...O kölcsönhatássá, másrészt egy 1,49 Å hosszúságú S=O kettős





21. ábra. 5 és 7 tagú laktongyűrűs spiroszulfurán (a) és gyűrűátrendezésével képződött szulfoxid (b) izomerje

kötéssé alakul. Nos, az általam leírt, csupán topológiai szempontból szalonképes izomerizációt Szabó Dénes úgy valósította meg, hogy száraz piridinben [43] hevítette a „széttépett” spiroszulfuránt (21/a. ábra). Ennek eredményeképpen kvantitatíve megkapta gondolatkísérletem végtermékét (21/b ábra),

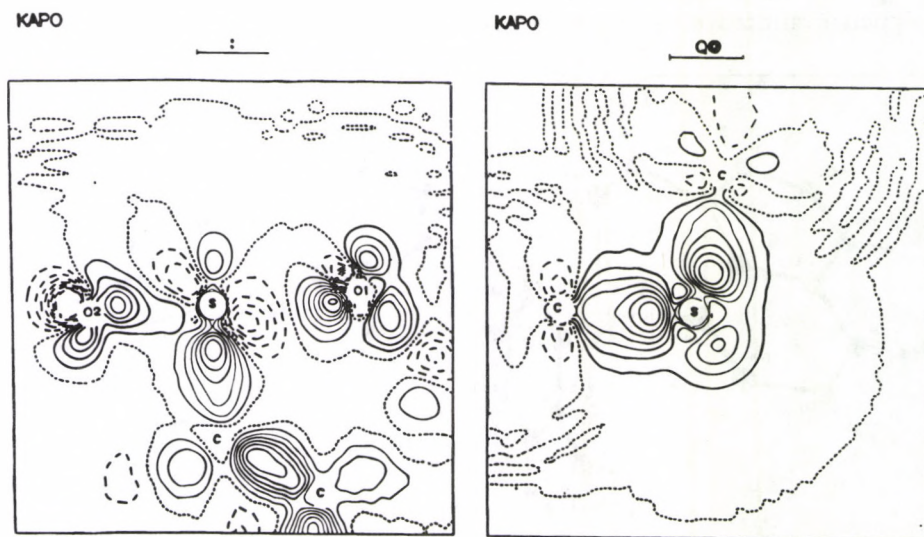


22. ábra. Aszimmetrikus spiroszulfurán izomerpár. Az 5, ill. 6 tagú laktongyűrű karbonilcsoportját  $\text{CH}_2$ -csoport helyettesíti

ismét bizonyítva az S–O kötések szoros összefüggését és kontinuitását a felírt tartományban (20. ábra).

Bárki joggal kérdezhetné, hogy van-e a két szélsőséges  $O \leftarrow S \rightarrow O$  és  $O \cdots S = O$  állapotú izomer között valamilyen átmeneti szerkezet? Igen, a Kapovits–Szabó-fogat ezt az állapotot is előállította. Az 6/5-ös spiro-szulfuránban az egyik karbonilcsoportot egy metilén-csoporttal cserélték ki egyszer alul, másszor felül (22. ábra). Eredmény: mindkét isomerben a hipervalens  $O \leftarrow S \rightarrow O$  kötés a nagyobb elektronegativitású karbonilcsoport felé kb. negyed Ångströmmel (25 pm) megnyúlt, míg a metilén-csoport irányába összehúzódva, megközelítette az S–O egyes kötés hosszát.

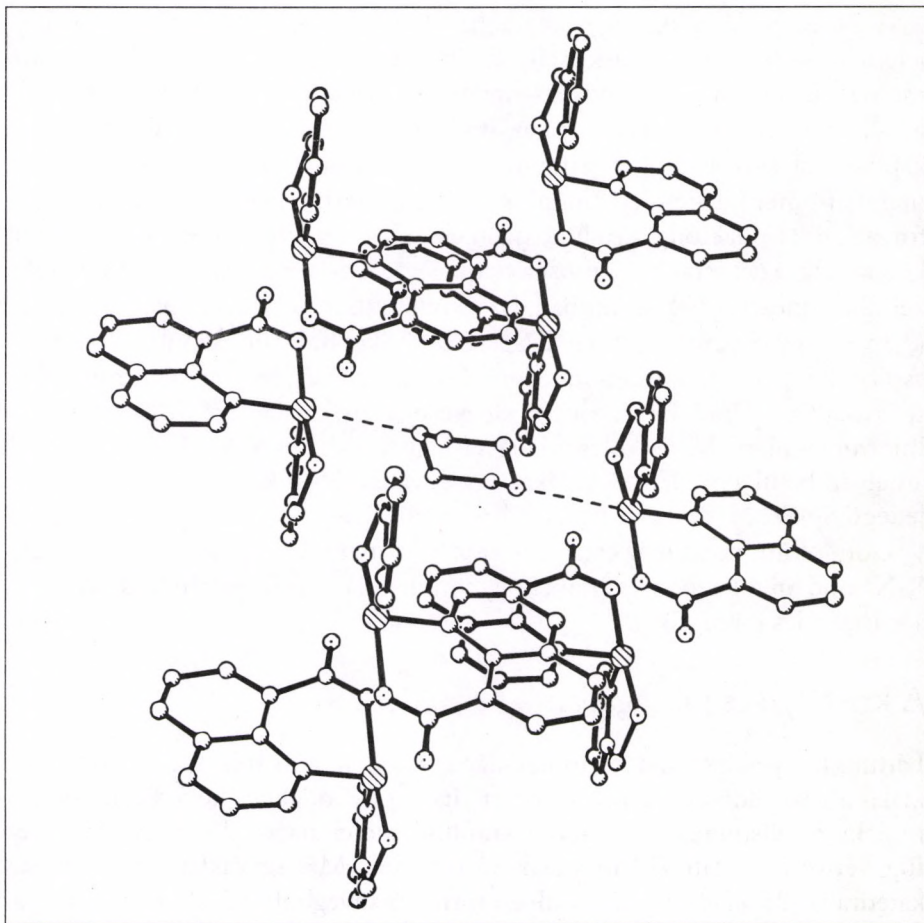
Nemrégiben egy nemzetközi konferencia megnyitó előadását tartva [44] felmerült bennem a kérdés, *hipervalensnek* tekinthetők-e még ezek a három-centrumos, de már erősen aszimmetrikus elrendeződések, vagy sem? Erre választ már csak deformációs elektronsűrűség-számítással adhatunk. Berlinben dolgozó tanítványom, Koritsánszky Tibor a szimmetriacentrummal bíró (22/a ábra) kristályrácsot felépítő szulfurán kristályát – bár a rácsban dioxán-zárvány található – alacsony hőmérsékleten újramérte, majd a saját maga kifejlesztette (ma már nemzetközileg használt) módszerrel kiszámította a deformációs elektronsűrűség fő síkjait (23. ábra). A jobb oldali metszet a várakozásnak megfelelően az S-aryl kötésekkel és a magános elektrópárral a C–S–C



23. ábra. A 22/a spiro-szulfán deformációs elektronsűrűség-eloszlása a C–S–C és egyik C–S–O síkban számolva



síkot mutatja. Ami meglehetősen, az a bal oldali metszeten látható. A kép vízszintes tengelyében van a két oxigén, középen a kénatommal. Ez utóbbin jobb oldalon nagy elektrondeficit (azaz pozitív töltés) látható. Átellenben az oxigénatom viszont jelentős elektronsűrűség-többlettel, azaz negatív töltéssel bír. A kénatom bal oldalán vékonyabb, kissé aszimmetrikus kovalens kötés található. Együtt a zwitterion és ez a kovalens egyes kötés a Musher-féle hipervalens állapot végét jelenti. A rendkívül stabil  $O \leftarrow S \rightarrow O$  helyett kialakuló zwitterion környezeti hatásokkal szembeni érzékenysége magyarázza a két izomer közötti



24. ábra. A 22/a spiroszulfán-molekula csomagolása a rácsba beépült dioxán-molekulák közreműködésével. Az ábra közepén ülő dioxán-molekula a szimmetriacentrum körül helyezkedik el

S...O kötéstávkülönbséget. Ezt látszik igazolni a 22/a ábrán (bal) látható királis-spiromolekula rezolválást követő újabb kristályszerkezet meghatározása. Ugyanis a kikristályosított enantiomerben, a diplomamunkáját készítő Nagy Péter vizsgálata szerint, az S...O kötés további gyengülést mutat. Ezek után a 22. ábrán bemutatott izomerpár racém kristályaira Nagy Péterrel elvégeztem az eddig elhanyagolt rácsgeometria kiértékelését. Az eredmény enyhén szólva felülmúlt minden várakozást, és jelezte azt is, hogy milyen oktan csak a molekulán belül maradni, mert a translációk megteremtette szupermolekula mindig tartogathat meglepetéseket.

A 24. ábrán látható, hogy a korábban bosszantónak vélt dioxán-molekula jelenléte a 22/a szulfurán-kristályrácsában különleges értelmet nyer. Szimmetriacentrumon ülve mindkét oxigénjével a Van der Waals-rádiuszok összegénél rövidebb, 3,1 Å hosszúságú, majdnem kollineáris C-S...O $\leftrightarrow$ O...S-C kapcsolatot hoz létre két naftalingyűrű  $\alpha$ -szénatomjával, ugyanakkor erre majdnem merőlegesen egy másik közvetlen intermolekuláris S...O kapcsolat formálódik a  $\gamma$ -laktongyűrű hídoxigénje és a szomszédos molekula kénatomja között, vigyázva arra, hogy most a benzolgyűrű  $\alpha$ -szénatomja üljön a megközelítőleg lineáris O...S-C hídban. Ez a kontaktus azonban már nagyon hosszú (3,35 Å), így csak igen gyenge diszperziós erőket indikált. Azonban létrejött a csoda: az akirális dioxán-vendégmolekula segítségével az aszimmetrikus spiroszulfurán-molekulák racém elegye egy viszonylag erős és egy gyenge intermolekuláris S...O kölcsönhatással egy valódi szupermolekulát épít fel, amelyen belül a gazdamolekulákat egy kovalens S-O kötés és egy zwitterion jellegű S...O kölcsönhatás egyensúlya stabilizálja.

Gondolom, most már értik, miért választottam e tétel címének, hogy „Az S-X bond bővületében”, s érzik, hogy a molekulákat milyen változások érhetik a kristályrács rabságában.

## A kristályrács rabságában

Láttuk, hogy abban az intermolekuláris rendben, ami spiroszulfuránunkban kialakult, az oldószer döntő szerepet játszott. Mindebből következik, hogy a molekula-felismerés és az abból kiinduló molekulatársulás nagymértékben függvénye az oldatfázisban kialakuló rendnek. Más szavakkal: az, hogy egy katedrális (25. ábra) végül is milyen formájú süvegboltozat alá kerül, függ az árkádpillérek szerkezetétől, méretétől, távolságától stb.

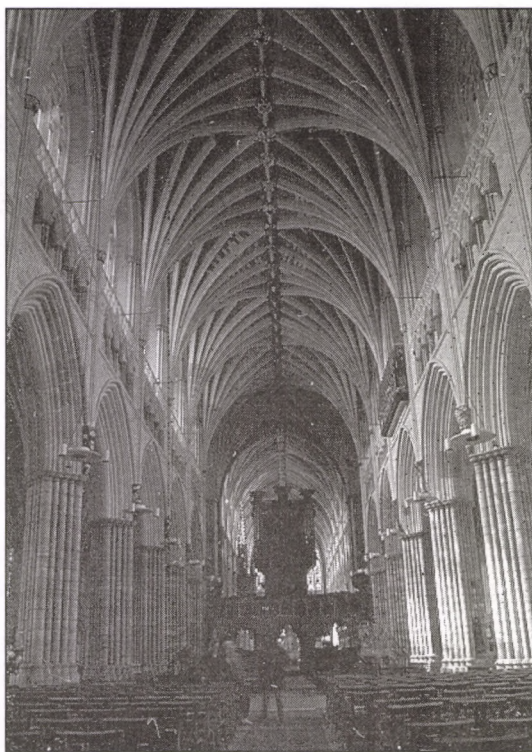
Először egy pontosan kontrollált alternatív kristályosítást szeretnék bemutatni. Ismét klasszikus példa kerül Önök elé. A '60-as évek közepén Lempert Károly és munkatársai azt tapasztalták, hogy a 26. ábrán látható tiohidantoin-



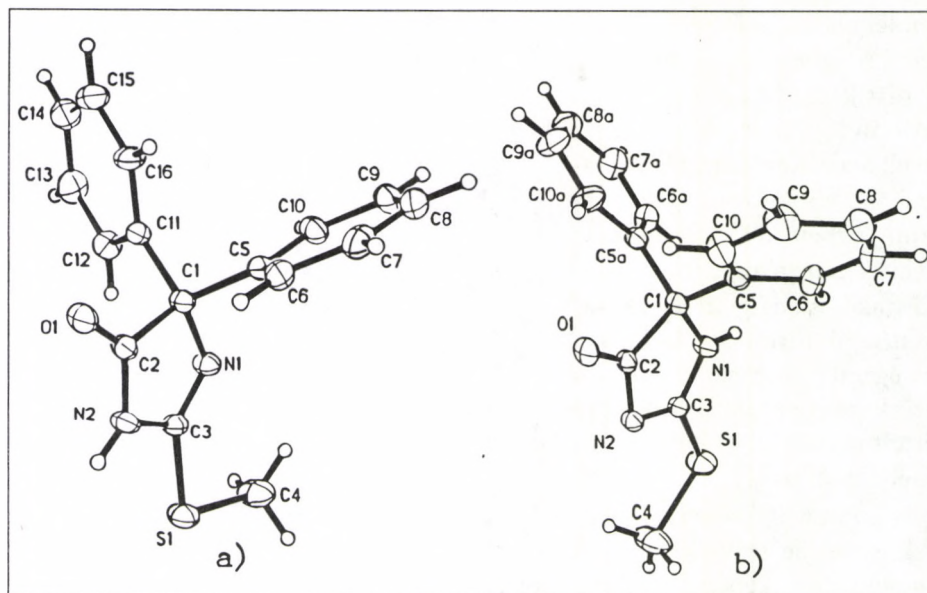
molekula az oldószer polaritásától függően hol az egyik, hol a másik tautomer formájában kristályosodik ki. A kristályok évek óta változatlanul fennmaradtak, laboratóriumunkban a múlt évben alacsony hőmérsékleten megismételt röntgendiffrakciós adatgyűjtést mindkettő jól tűrte. Az 1972-ben elvégzett röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározások egyértelműen eldöntötték, hogy melyikben izoláltak és melyikben konjugáltak a kettős kötések, s megerősítették az *izolált* molekulák képezte dimer asszociátum infraspektrumának Sohár Pál által adott korábbi helyes értelmezését. Rátételezve az *izolált* molekula apoláros oldószerben (pl. a kloroform) felvett konformációjára, a mobil proton csak úgy kaphat árnyékolást, hogy a

kifelé apoláros fenil- és metilcsoportok képezte sík túlsó oldalán egy inverzióval odaforduló másik molekula karbonilcsoportjával képez hidrogénhidat. A kialakuló dimerben a másik molekula protonja is ugyanígy jut árnyékoláshoz. Poláros oldószerben (pl. az etanol) részben mind a proton-, mind a karbonilcsoport kaphat hidrogénhidat eredményező árnyékolást a hidroxilcsoportoktól. Ez azután a kristályosodást elindító molekuladokkolásban transzlációval összekapcsolódó végtelen hidrogénhíd-lánchoz vezet. A hidrogénhidak kooperatív effektusa miatt ez a kristály is igen stabilis. Egyébként az akirális *konjugált* molekulák tükörsíkon ülve, annak végtelen síkjában hozzák létre a transzláció formálta hidrogénhíd-láncot. Természetesen az oldószerhatás általában sokkal bonyolultabb, mint a polimorfia sajátos esetét képviselő tiohidantoin most bemutatott annuláris dezmotrópiája.

Igen csábító volna a gyomorsav túltermelését blokkoló, ún. hisztamin  $H_2$ -receptor-antagonisták, mint pl. a cimetidin és az analóg famotidin oldószer,



25. ábra. Az exeteri katedrális „díszített gótikus” hajója

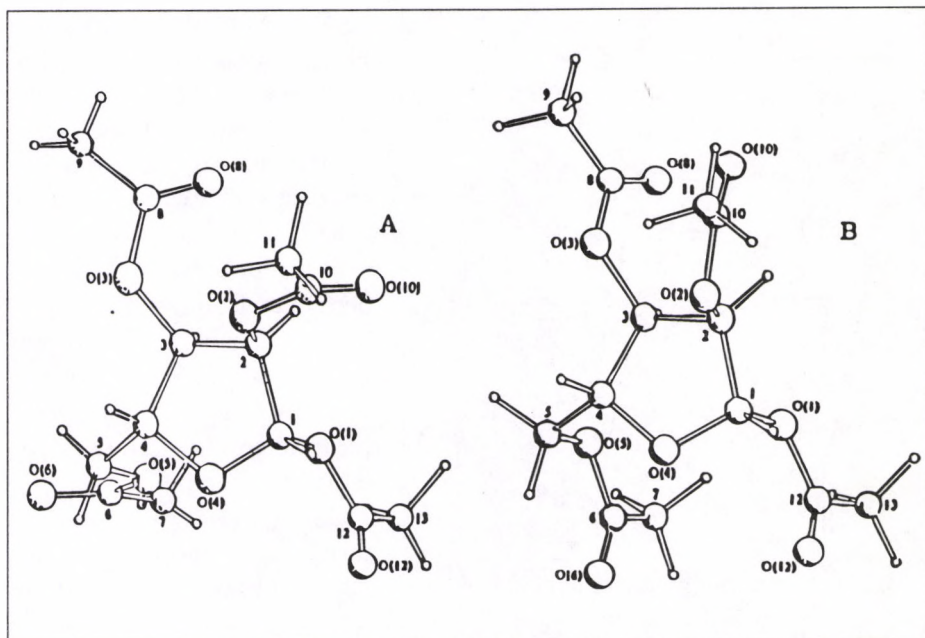


26. ábra. Az *S*-metil-5,5-difenil-2-tiohidantoin dezmotróp párjának térszerkezete

koncentráció, hőmérséklet stb. kontrollálta, változatos polimorfiját bemutatni, de a maradék időm ezt már nem teszi lehetővé. Ezt a fontos kérdést a *Kémiai Közleményekben* nemrégiben összefoglaltuk [46]. Egy igazán izgalmas jelenséget azonban mondandóm végére hagytam.

Intézetünkben (KKKI) Kovács József 1981-ben az általa előállított tetraacetilribofuranóz olvadáspontját (58 °C) jelentősen különbözőnek találta a közismert irodalmi adattól (85 °C). Az ellentmondást tisztázó irodalmazás érdekes eredményre vezetett. 1950-ig csak az alacsony, 58 °C körüli olvadáspontú kristály volt ismert, a továbbiakban azonban a magasabb 85 °C-on olvadó módosulat dominál [47]. A kiváló krisztallográfus, A. L. Patterson a *Nature*-ben [48] a következő meglepő jelenséget írta le: Az 58 °C-on olvadó monoklin kristályok a magasabb olvadáspontú rombos módosulat porával meghintve robbanásszerűen szétesnek, és átalakulnak a magasabb olvadáspontú formává. Ugyanabban a helyiségben a két módosulatot nyitott edényben hagyva, a monoklin kristályok pár óra alatt átalakultak és eltűntek. A monoklin kristályról egyébként ez volt az utolsó tudósítás. Bár különleges módszerekkel, pl. nagy nyomással is próbálkoztak, többé nem tudták előállítani. Így már csak a rombos cella kristályszerkezetét tudták egymástól függetlenül felderíteni az USA-ban és Ausztráliában [49, 50]. Az ilyen jelenség a gyógyszergyárak és



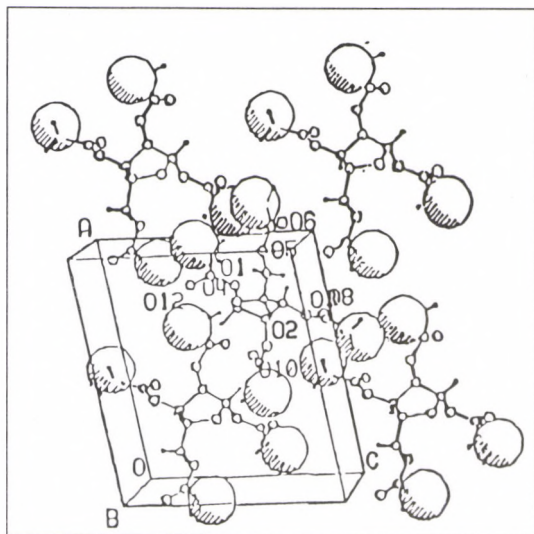


27. ábra. A tetraacetyl- $\beta$ -ribofuranóz irreverzibilis polimorfája.

(A) alacsony olvadáspontú monoklin, (B) magasabb olvadáspontú rombos (stabilis) módosulat molekulageometriája

más, kristályokkal foglalkozó cégek réme. Egy bevezetett módosulat eltűnése teljesen tönkretelheti a reá felépített gyártási technológiát.

Nos, Kovács József ezt az évtizedekre eltűnt monoklin módosulatot állította elő centiméteres kristályok formájában. Felderítettük a szerkezetet [51], és megállapítottuk, hogy a kristálytani adatok megegyeznek a Patterson és Groschens által utoljára 1954-ben látott kristályéval. Szerkezetfelderítésünk meglepően azt mutatta, hogy a monoklin formában lévő homokirális molekula konformációja (27. ábra) alig tér el a rombos formában észlelttől [49,50]. Különböző energiaszámítások stb. után a kristályrácsban kialakult molekulailleszkedést vettem részletes vizsgálat alá. E vegyületben hidrogénhidak nem képződhetnek, így másban kellett az okot keresni. Végül kitűnt, hogy az instabil monoklin formában három igen rövid  $H\cdots H$  kontaktus található, amelyek igen nagy feszültségeket okozhatnak. A 28. ábrán két kontaktust mutatok be. Ezek a rombos formából teljesen hiányoznak. Eredményünk nemrégiben az USA-ban tankönyvbe került [52], ezért a múlt évben a még mindig stabil kristályt alacsony hőmérsékleten újra kimértük, és Bombicz Petra megerősítette



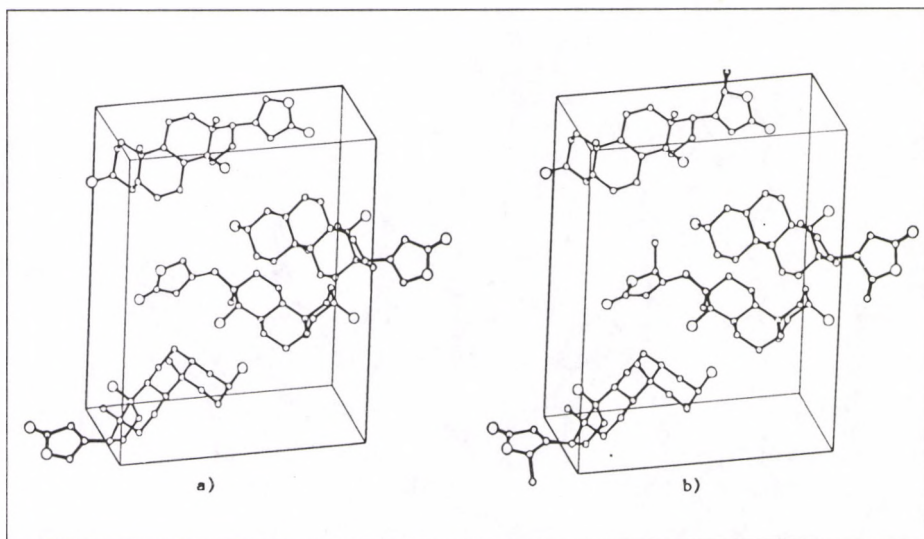
28. ábra. Az alacsony olvadáspontú monoklin kristályrács csomagolása a rövid  $H\cdots H$  kontaktusok megjelölésével

az általam talált három rövid  $H\cdots H$  kontaktust. Mivel a hidrogénatomok helyének lokalizálása röntgendiffrakcióval igen pontatlan, egy svéd kooperációs pályázat elnyerésével neutrondiffrakciós mérésre készülünk. Az MTA kiküldetésében Bombicz Petra áprilisban utazik a Stockholm közelében lévő neutrondiffraktométerhez. Kovács József centiméteres kristályai most jó szolgálatot tesznek.

A polimorfia bemutatott formáiban rejlő, esetenként szinte misztikusnak tűnő jelenségek irányították a figyelmet (először 1984-ben) az ellentétes jelenségre, amelyet

Mitscherlich javaslatára 1819 óta közérthetően, de pontatlanul *izomorfiának* neveznek. Ha ugyanazon molekula egészen kis fizikai-kémiai hatásokra más-más illeszkedéssel tud kristályosodni, hogyan lehetséges, hogy bizonyos rokon molekulák kisebb-nagyobb szerkezeti különbségek ellenére azonos molekuláris illeszkedéssel kristályosodnak? A 29. ábra jól érzékelteti, hogy a kardiotóniás digitoxigenin azonos kristályszerkezetű a jelentős térigénnyel belépő 21S-metil-csoportot viselő származékával. További három származék mutat még szigorú izostrukturalitást az anyamolekulával. Hasonló izostrukturalitást mutatott még több rokon varangyméreg- (bufadienolid-) pár is. Ezek illeszkedésének részletes elemzése, amit a nyugat-ausztráliai Perthben 1987-ben rendezett IUCr-kongresszuson mutattam be [53], megvetette a izostrukturalitás kialakulásának feltételeire és korlátaira vonatkozó elméletem alapját [54, 55]. 1993-ban közzétettük az izostrukturalitást mutató szerves molekulák eddig felderített eseteit és ezek rendszerezését [56]. Igazi sikernek azt tartom, hogy homomolekuláris rendszerek izostrukturalitásának rendszerezéséből kiindulva ki mertem mondani, hogy a heteromolekuláris társulások, elsősorban klatrátok nagy valószínűséggel mutathatnak izostrukturalitást mindazon esetekben, amikor a gazdamolekulák komplementaritása nagy. „Az ige testté lőn...” Bombicz Petra és Czugler Mátyás az elmúlt évben számos



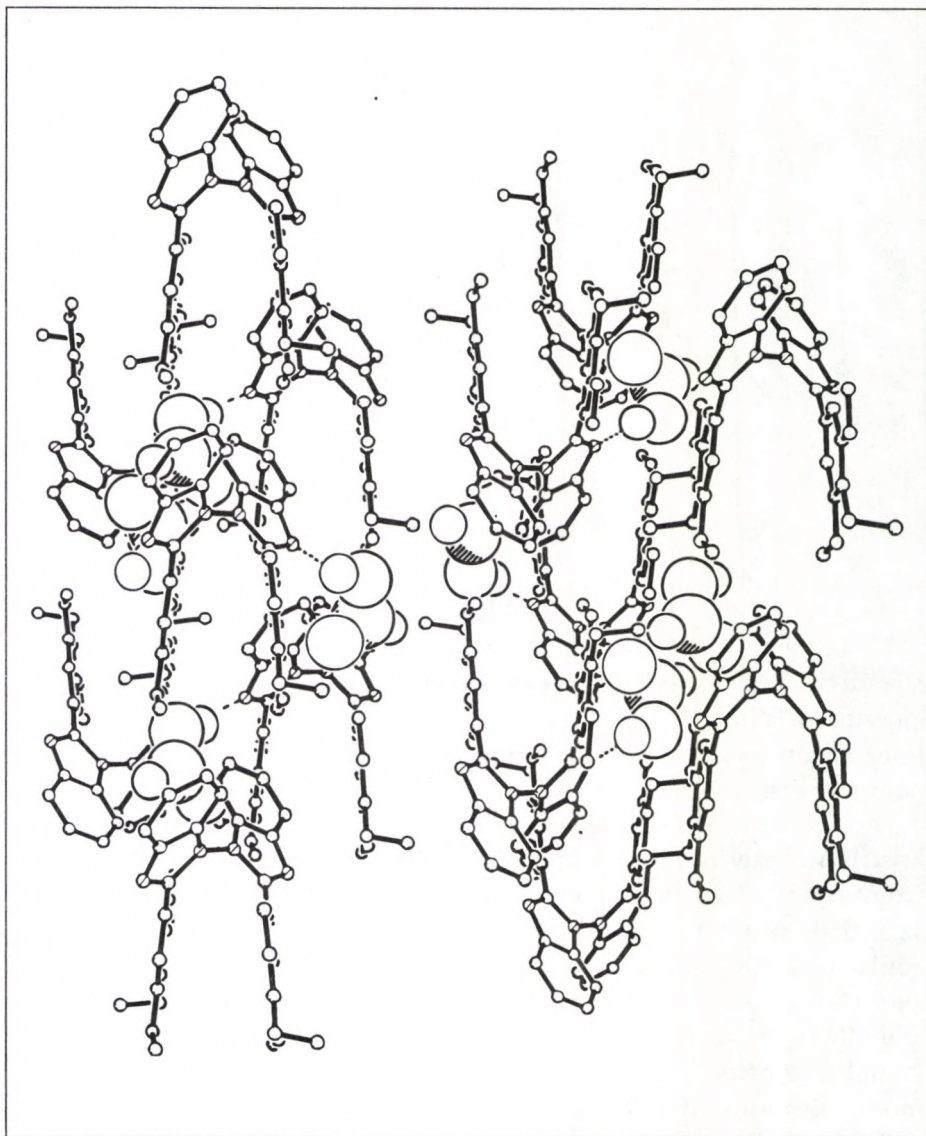


29. ábra. A digitoxigenin a) és a 21S-metil-digitoxigenin b) izostrukturális szerkezetpárja

izostrukturális klatrátot állított elő laboratóriumunkban, sőt, amint pár napja kiderült, a Fábíán László diplomamunkájában vizsgált ún. Piedfort-komplexek között is észleltünk izostrukturalitást, mégpedig az ellentétes karakterű polimorfia társaságában.

Mondandóm végére érve úgy érzem, hogy Náray-Szabó *romanikát* mutató kristályaitól pályám végső szakaszában eljutottam a *kristálygótika* csúcsára! Ezt a tanítványaim készítette és szerkezetükben felderített supermolekulák jelentik az általam megjósolt izostrukturalitással. Beauvais fölé már nem emelkedhet gótika, csak kiteljesedhet. Mutassa ezt Petra új zárványkomplexe (30. ábra), ahol a Speier Gábor szintetizálta *bisz*-benzimidazol-molekula Párkányi László felderítette kristályrácsába [57] két hangyasav úgy tud beépülni, hogy az új komplex az eredeti gazdaráccsal izostrukturális marad. E rács szépsége számomra Beauvais mérműves ablakainak szépségével vetekszik.

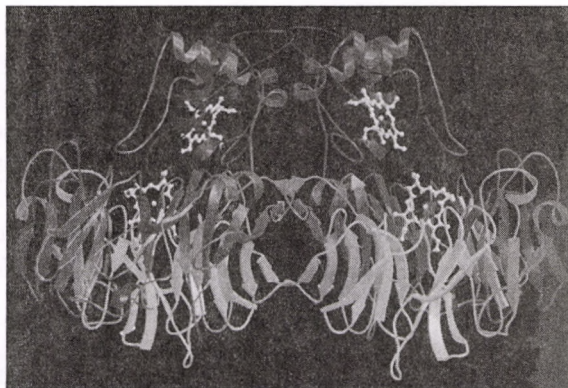
Tanítványaim másik csoportja a kor szavának megfelelően a fehérjeszerkezet-kutatásokban jeleskedik. A Fülöp Vilmos Oxfordban felderített 620 aminosavból álló citokróm cd1 enzim szerkezete [58] az egyik csúcs (31. ábra), de számomra ez már a *barokk* (32. ábra). Csodálom, büszke vagyok tanítványom publikációjára a 33-as impakt faktorú *Cell*-ben, de ez már nem az én világom. Áll azonban a híd, mely szorosan összeköti Náray-Szabó korai és későbbi unokáit az élő jövővel. Büszke lenne fiaira és unokáira. S hiszem, hogy a másik



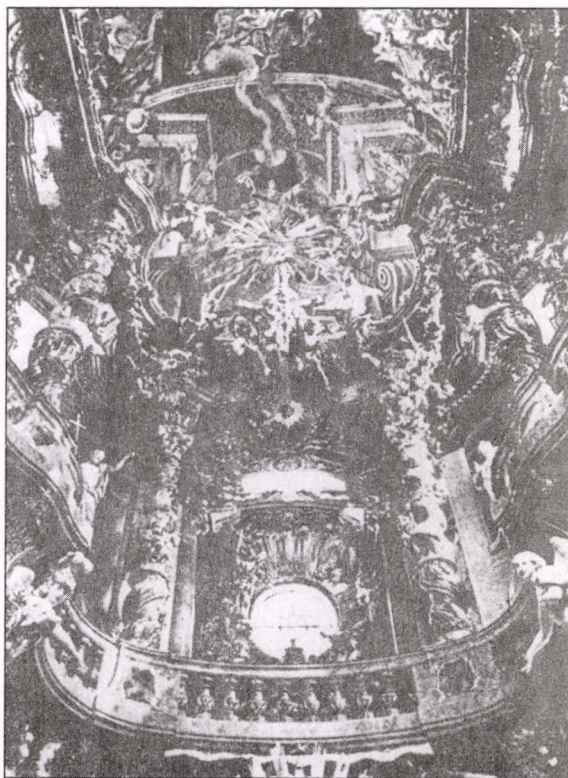
30. ábra. A kétfogású szimmetriatengelyen ülő bisz-benzolimidazol-származék molekulák hangyasavval képzett szupermolekulája

kedves professzorom, Bruckner Győző is örülne a Náray-Szabó Istvánnal három évtizede közösen elindított röntgendiffrakciós szerkezetkutatások kiteljesedésének.





31. ábra. A citokróm cd1 enzim kristályszerkezete



32. ábra. Barokk templombelső, a müncheni  
Nepomuki Szent János-templom belseje

## Köszönetnyilvánítás

Közvetlen munkatársaimról és tanítványaimról már többször is megemlékeztem. Sasvári Kálmán nevét mégis külön szeretném nagy tisztelettel megemlíteni. Tőle tanultam meg az *írás* nehéz és gyötrelmes mesteriségét. Nem lehet közöttünk, gyengélkedése megakadályozta, hogy itt legyen körünkben. Innen küldöm neki köszönetemet és jókívánságomat. Az asszisztenseim közül köszönettel tartozom Kertész Csaba technikusnak a több mint 30 éves hűséges munkájáért. Ugyancsak köszönöm titkárnőm, Tóthné Csákvári Györgyi és üzemmérnököm, Virágh Tibor sokoldalú támogatását és emberi hűségét. Volt munkatásaim közül Járdánházy Judit és néhai Matkó Gusztávné nevét pályakezdő éveimben nyújtott segítségükért soha el nem felejtetem. Az intézetben velem együttműködő kollégáim fogadják kollektív köszönetemet. Az MTA KKKI-ban mint első munkahelyemen eltöltött közel negyven év alatt igazgatóim voltak:

Schay Géza akadémikus, aki Náray-Szabó mellé asszisztensnek felvett, s akitől a publikációs tevékenységben tanultam sokat;

Nagy Ferenc akadémikus, aki tudományos csoportvezetőnek kinevezett, és segített az első diffraktométer megszerzésében;

Holló János akadémikus, aki tudományos osztályvezetőnek kinevezett, és segített a számítógép vezérelte diffraktométer megszerzésében és Náray-Szabó érdemeihez méltó visszavonulásának elintézésében. Hálás köszönettel tartozom mindhármuknak.

Jelenlegi igazgatóm, Márta Ferenc akadémikus tizenöt éve támogatja munkámat. Páratlan segítséget nyújtott a röntgendiffrakciós laboratóriumunk 1991. évi korszerűsítésében. Mégis elsősorban azért szeretnék neki köszönetet mondani, mert négy kudarc ellenére az akadémiai tagságra való jelölésben mindvégig kitartott mellettem.

A több mint kétszáz hazai és 17 külföldi kutatótársamnak, akik sokoldalú publikációs együttműködésben részt vettek, egyedileg köszönetet nem mondhatok, nevüket természetesen a bemutatott diapozitíveken felsoroltam. Kucsman és Kapovits professzor nevét ismételten szeretném kiemelni, mert a velük való kutatói kapcsolatunk mutatja, hogy mire mehet együtt szerves kémikus és szerkezetkutató. Bernáth Gábor és Sohár Pál professzorokkal való, ugyancsak több évtizedes, szoros együttműködésem elismerése az 1994-ben közösen elnyert Széchenyi-díj. Külföldi partnereim közül csak Ribár Béla professzornak, a Vajdasági Tudományos Akadémia levelező tagjának nevét szeretném említeni. Több mint 20 éves termékeny kapcsolatunk módját nyújtott arra, hogy értékes tudományos eredményeket közösen publikálva, a hatá-



rainkon kívül élő magyarság érdekeit csendben, de érdemben szolgáljuk. Ebből a kooperációból született az izostrukturalitás vissza-visszatérő jelenségének felismerése.

Az utolsó szó jogán néhai szüleimre kell emlékezni. De lehet-e az anyai szeretetet szavakba öntve megköszönni? Ez maradjon bensőm titka. Édesapámról, néhai Kálmán Péterről azonban szólanom kell. Nem volt nadrágos ember, a Magyar Tudományos Akadémia erdőőre volt a rákoskeresztúri birtokon, ahol a háború nehéz éveit szamurájhűséggel védte a nemzet legfelsőbb szellemi intézményének vagyonát a nyilasokkal, a katonasággal és az SS-legényekkel szemben. A Gestapo elhurcolta, de az erdőben dülő tíznapos csata ellenére visszaszökött szolgálati helyére. 1945 tavaszán azután az emberi felelőtlenség és kapzsiság elpusztította az Akadémia ezer hold erdejét, őt magát ismét csak a szerencse mentette meg a pusztulástól. Azután évek alatt gyökerekből az erdőt újrateremtette, s várta, hogy az államosított erdő egyszer majd visszakerül az Akadémia tulajdonába. Ezt meg nem érthette, s be sem következett, de ha naponta oda-vissza Rákoshegyről a Rózsadombra utazván ezen erdőn áthaladok, a levelek suttogásában érzem az édesapám szellemét.

## Irodalom

1. Náray-Szabó, St.: *Z. Krist.*, 71, (1929) 103.
2. Náray-Szabó, St., Taylor, W. H., Jackson, W. S.: *Z. Krist.*, 73, (1930) 117.
3. Kálmán, A.: *Acta Cryst.*, 22, (1967) 501.
4. Náray-Szabó, I., Kálmán, A.: *Szilicatechnik*, 12, (1961) 316.
5. Jaffé, H. H.: *J. Phys. Chem.*, 58, (1954) 185.
6. Náray-Szabó, I.: *Szilikátekémiai Monográfiák III. A szilikátúvegek fizikai tulajdonságai*. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1962.
7. McMurdie, H. F.: *J. Res. Nat. Bur. Stand.*, 26, (1941) 489.
8. Eitel, W.: *Silicate Science*, Vol I. Silicate Structures p. 62, Academic Press, New York, 1964.
9. Bassi, G., Lajzerowicz, J.: *Bull. Soc. franc. Minér. Christ.*, 88, (1965) 342.
10. Liebau, F.: *Glast. Ber.*, 35, (1962) 362.
11. Cruickshank, D. W. J.: *J. Chem. Soc.*, (1961) 5486.
12. Náray-Szabó, I., Argay, Gy.: *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.*, 39, (1963) 85.
13. Kálmán, A., Cruickshank, D. W. J.: *Acta Cryst.*, B26, (1970) 436.
14. Kálmán, A., Stephens, J. S., Cruickshank, D. W. J.: *Acta Cryst.*, B26, (1970) 1451.
15. Kálmán, A., Cruickshank, D. W. J.: *Acta Cryst.*, B26, (1970) 1782.
16. Siegel, S., Tani, B., Appleman, E. H.: *Inorg. Chem.*, 8, (1969) 1190.
17. Gundersen, G., Hedberg, K., Huston, J. L.: *J. Chem. Phys.*, 52, (1970) 812.
18. Kálmán, A.: *J. Chem. Soc.*, (A) (1971) 1857.
19. Güdel, H. U., Ballhausen, C. J.: *Theor. Chim. Acta*, 25, (1972) 331.
20. Kálmán, A., Duffin, B., Kucsman, Á.: *Acta Cryst.*, B27, (1971) 586.
21. Kálmán, A., Sasvári K.: *Cryst. Struct. Commun.*, 1, (1972) 243.
22. Cook, R. E., Click, M. D., Rigau, J. J., Johnson, C. R.: *J. Am. Chem. Soc.*, 93, (1971) 924.

23. Cameron, A. F. Hair, N. J., Morris, D. G.: *J. Chem. Soc., Perkin II*, (1973) 1951.
24. Kucsman, Á., Kálmán, A., Kapovits, I.: *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.*, 53, (1967) 97.
25. Kálmán, A.: *Atomsoportok és molekulák struktúrájának röntgendiffrakciós meghatározása és értelmezése*. (doktori értekezés) MTA, Budapest, 1974.
26. Kálmán, A., Párkányi, L., Schawartz, J.: *Acta Cryst.*, B33, (1977) 3097.
27. Kálmán, A., Czugler, M., Argay, Gy.: *Acta Cryst.*, B37, (1981) 868.
28. Bombicz, P., Czugler, M., Kálmán, A., Kapovits, I.: *Acta Christ.*, B 52 (1996) 720.
29. Musher, J. I.: *Angew. Chem. Int. (English)*, Ed. 8, (1969) 54.
30. Kapovits, I., Kálmán, A.: *J. Chem. Soc. Chem. Commun.*, (1971) 649.
31. Kálmán, A., Sasvári, K., Kapovits, I.: *Acta Cryst.*, B29, (1973) 355.
32. Sólyom, S., Sohár, P., Toldy, L., Kálmán, A., Párkányi, L.: *Tetrahedron Letters*, (1977) 4245.
33. Kálmán, A., Párkányi, L.: *Acta Cryst.*, B36, (1980) 2372.
34. Kucsman, Á., Kapovits, I., Párkányi, L., Argay, Gy., Kálmán, A.: *J. Mol. Struct.*, 125, (1984) 331.
35. Kucsman, Á., Kapovits, I., Kövesdi, I., Kálmán, A., Párkányi, L.: *J. Mol. Struct.*, 127, (1985) 135.
36. Kucsman, Á., Kapovits, I., Czugler, M., Párkányi, L., Kálmán, A.: *J. Mol. Struct.*, 198, (1989) 339.
37. Párkányi, L., Kálmán, A., Kucsman, Á., Kapovits, I.: *J. Mol. Struct.*, 198, (1989) 355.
38. Lam, W. Y. Duesler, E. N., Martin, J. C.: *J. Am. Chem. Soc.*, 103, (1981) 127.
39. Szabó, D., Kapovits, I., Kucsman, Á., Fülöp, V., Czugler, M., Kálmán, A.: *Struct. Chem.*, 1, (1990) 305.
40. Szabó, D., Kapovits, I., Kucsman, Á., Czugler, M., Fülöp, V., Kálmán, A.: *Struct. Chem.*, 2, (1991) 529.
41. Szabó, D., Kapovits, I., Kucsman, Á., Huszthy, P., Argay, Gy., Czugler, M., Fülöp, V., Kálmán, A., Koritsánszky, T., Párkányi, L.: *J. Mol. Struct.*, 300, (1993) 23.
42. Kapovits, I., Rábai, J., Szabó, D., Czakó, K., Kucsman, Á., Argay, Gy., Fülöp, V., Kálmán, A., Koritsánszky, T., Párkányi, L.: *J. Chem. Soc. Perkin II*, (1993) 847.
43. Kálmán, A., Párkányi, L., Szabó, D.: *J. Mol. Struct.*, 317, (1994) 279.
44. Kálmán, A.: *Croat. Chem. Acta*, 66, (1993) 519.
45. Lempert, K., Nyitrai, J., Zauer, K., Kálmán, A., Argay, Gy., Duisenberg, A. J. M., Sohár, P.: *Tetrahedron*, 29, (1973) 3565.
46. Kálmán, A., Argay, Gy.: *Kém. Közl.*, 71, (1991) 129.
47. Zinner, H.: *Chem. Ber.*, 83, (1950) 153.
48. Patterson, A. L., Groshens, B. P.: *Nature* (London) 173, (1954) 398.
49. James, V. J., Stevens, J. D.: *Cryst. Struct. Commun.*, 2, (1973) 609.
50. Poppleton, B. J.: *Acta Cryst.*, B32, (1976) 2702.
51. Czugler, M., Kálmán, A., Kovács, J., Pintér, I.: *Acta Cryst.*, B37, (1981) 172.
52. Glusker, J., Lewis, M., Rossi, M.: *Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists*, VCH publishers, Inc., New York, USA. (1984).
53. Kálmán, A., Argay, Gy., Fülöp, V., Ribár, B., Lazar, D.: *Acta Cryst.*, A43, (1987) 566.
54. Kálmán, A., Argay, Gy., Scharfenberg-Pfeiffer, D. Höhne, E., Ribár, B.: *Acta Cryst.*, B47, (1991) 68.
55. Kálmán, A., Argay, Gy., Zivanov-Stakie, Vladimirov, S., Ribár, B.: *Acta Cryst.*, B48, (1992) 812.
56. Kálmán, A., Párkányi, L., Argay, Gy.: *Acta Cryst.*, B49, (1993) 1039.
57. Speier, G., Párkányi, L.: *J. Org. Chem.*, 51, (1986) 218.
58. Fülöp, V., Moir, J. W. B., Ferguson, S. J., Hajdu, J.: *Cell*, 81, (1995) 369.



Pálinkás Gábor

az MTA levelező tagja

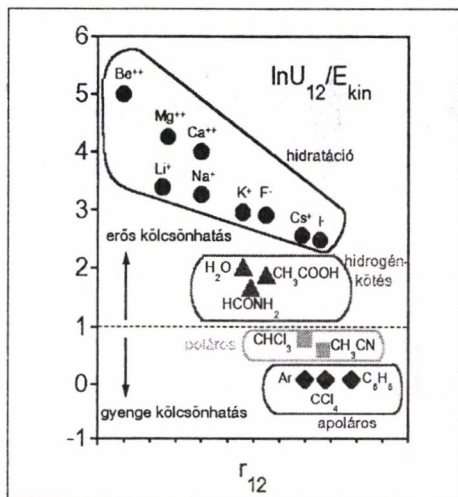
# MOLEKULÁRIS OLDATKÉMIA

A rácsmodellektől a molekuladinamikai  
konfigurációkig

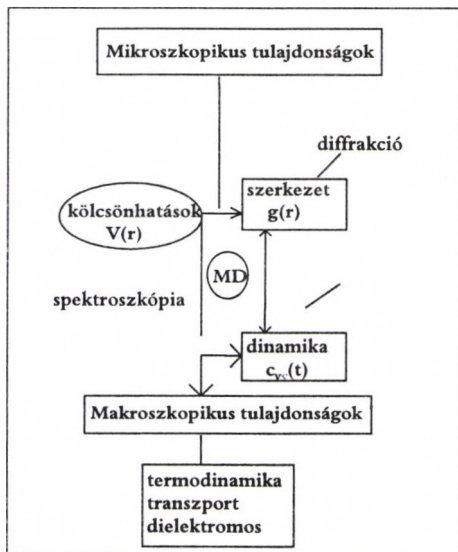
Elhangzott 1996. március 19-én

**A** mikor egy oldószerben sót oldunk, a jelenségek egy széles tárát figyelhetjük meg. Megváltoznak az oldószer tulajdonságai, és az oldatot jellemző új tulajdonságok is megjelennek. A változás megfigyelhető mikroszkopikus molekuláris méretekben – megváltozik az oldószer szerkezete –, fellép a solvatáció jelensége – az oldott anyag koordinálja és orientálja környezetében az oldószer-molekulákat –, és megváltozik az oldószer-molekulák dinamikája is. De megfigyelhető a változás makroszkopikus szinten a termokémiai vagy transzporttulajdonságok változásában, a többlettulajdonságok megjelenésében is.

A változás oka, tudjuk, az oldott anyag molekuláinak kölcsönhatása az oldószer-molekulákkal és tömény oldatok esetében saját molekuláival is. Egy folyadék szerkezetét és dinamikáját két hatás, a molekulák kölcsönhatása és a hőmozgás versengése alakítja ki. Az 1. ábrán e két hatás átlagos energiájának hányadosát tüntettem fel logaritmikus skálán, különböző molekulapárok esetében, egy kivételével szobahőmérsékleten, közelítőleg a párok kontakt távolságának a függvényében. Minél nagyobb ez a hányados egynél, annál nagyobb lokális rendeződés várható az adott folyadékban. Az ábra felső részében ion-víz kölcsönhatások, lejjebb a hidrogénhidas oldószerek, víz, alkoholok, amidok,



1. ábra



2. ábra

végül poláros és apoláris folyadékok molekulapárjainak energiaviszonyai láthatók. Az ábra alapján megérthető, hogy folyadékállapotban a molekulák lokális rendezettségének mértéke széles skálán mozoghat, kezdve a molekulák alakjától, a tisztítóerők által meghatározott véletlenszerű illeszkedéstől, egészen az erős vonzó kölcsönhatások hatására létrejövő hosszú élettartamú, együtt mozgó molekulahalmazokig, asszociátumokig.

Az oldódáskor fellépő jelenségekkel és azok molekuláris értelmezésével foglalkozó tudományterület az oldatkémia. Ez az a tudományterület, amelynek kérdései az elmúlt több mint negyedszázad alatt foglalkoztatottak. Ez alatt az idő alatt számos oldószer és oldat szerkezetét tanulmányoztuk munkatársaimmal kísérleti úton, és modelleztük szerkezetét és dinamikáját elméleti úton. A pályám kezdetétől fogva izgattak az oldatkémia olyan fundamentális fogalmai, mint a hidrogénhidás oldószerek és elegyek szerkezete, az ionhidratáció és -szolvatáció, az ionok szerkezet-építő és -romboló hatása és a hidrofób hidratáció.

A molekuláris oldatkémia az oldatok szerkezetét, dinamikáját és makroszkopikus tulajdonságait a molekulák kölcsönhatása alapján vezeti le

(2. ábra). A kölcsönhatásokat a kvantumkémiai módszerekkel számíthatjuk, kísérleti evidenciákkal a molekulaütköztetési kísérletek szolgálhatnak, mind a szerkezet, mind a dinamika az anyag és sugárzás kölcsönhatásának analízisével tanulmányozható.



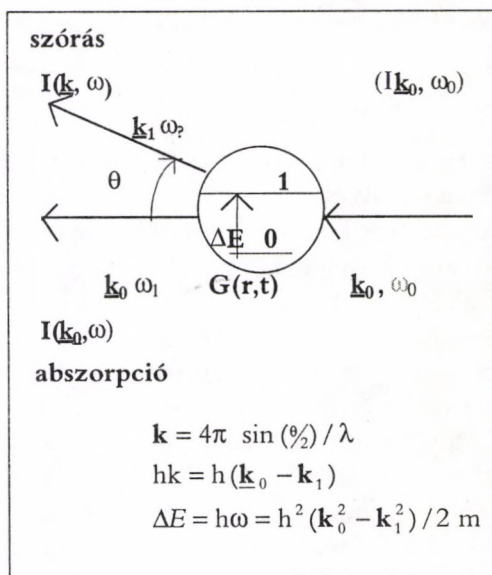
Az oldatok szerkezetéről a diffrakciós kísérletekből nyerhetünk információt, a molekulák mozgásformáiról, korlátozott translációs és rotációs szabadsági fokokról, az intermolekuláris kölcsönhatások miatt perturbált rezgéseikről, a mozgásformák karakterisztikus idejéről a különböző spektroszkópiai módszerek, az optikai, az NMR, az ultrahang- és dielektromos spektroszkópia szolgálat kísérleti adatokat. A makroszkopikus tulajdonságokról termokémiai, transzport és elektromos mérésekkel szerezhetünk információt.

A molekuláris szinten a molekulák kölcsönhatási energiái a centrális mennyiségek. A folyadékok szerkezete valószínűsége-sűrűség-függvényekkel, páreloszlásfüggvényekkel jellemezhető; egy páreloszlásfüggvény  $g(r)$  annak a valószínűségével arányos, hogy egy kiválasztott részecskétől adott távolságban találunk egy másikat. A molekulák mozgása időkorrelációs függvényekkel írható le. A kölcsönhatás-szerkezet-dinamika kapcsolatok felderítésének a módszere a modellezés.

Az 1960-as években folyadékdiffrakciós vizsgálatok csak néhány kutatócsoportban, az Egyesült Államokban, Olaszországban, Angliában, Hollandiában és Ukrajnában folytak. Számos metodikai kérdés megoldása állt előttünk a munkánk kezdetén. A folyadék röntgendiffrakciós kísérleti technika Lengyel Sándorral és Hajdú Ferencsel történt meghonosítása után atomok, ionok koherens és Compton-szórási függvényeit kellett kiszámítanunk, kísérleti korrekciós függvényeket kellett kidolgoznunk, pontosítani kellett a folyadékok szerkezetét jellemző páreloszlásfüggvények és a röntgendiffrakciós kísérleti szórás-függvények kapcsolatát megadó elméletet is.

Az utóbbi feladatok valamivel később megismétlődtek a folyadék-elektrodiffrakció esetében is, amelynek kísérleti megoldását intézetünkben Kálmán Erika és munkatársai valósították meg a világon egyedülállóan az 1973–1975 közötti években.

A 3. ábrán az anyag és sugárzás kölcsönhatásakor fellépő jelenségeket láthatjuk. Ha  $k_0$  hullámvektorú és  $\omega_0$  energiájú monokroma-



3. ábra

tikus sugárzással bombázzuk az anyagot, akkor a kölcsönhatás következtében rugalmas és rugalmatlan folyamatok is lejátszódnak. Fellép az abszorpció és szórás jelensége is. A jelenségeket a folyadék molekuláinak energiaállapotai és molekuláinak tér- és időfüggő páreloszlásfüggvényei határozzák meg. A  $G(r, t)$  ún. Van Hoff-korrelációs függvény statisztikus rendszerek esetében olyan centrális jelentőségű, mint a kvantumrendszerek esetében a hullámfüggvény. A rugalmas szórás a szerkezet jellemzőitől függ, a rugalmatlan szórást vagy abszorpciót a rendszer dinamikája határozza meg. Mind a diffrakciós, mind a spektroszkópia-jelenségeket a  $G(r, t)$  korrelációs függvény Fourier-transzformáltja, a rendszer dinamikus formfaktora határozza meg.

$$I(k, \omega) \sim S(k, \omega) = \int e^{i(kr - \omega t)} G(r, t) dr dt$$

	$R / c$	$\Delta E / E$
röntgen	$< \tau_v$	$<< 1$
elektron	$< \tau_v$	$< 1$
neutron	$\sim \tau_v$	$\sim 1$
$S(k) \rightarrow$	$G(r, 0) = g(r)$	
$\alpha, \beta \rightarrow$	$g_{\alpha, \beta}(r)$	
$S(k) = 1 + \frac{4\pi\rho_0}{k} \sum_{\alpha\beta} f_\alpha f_\beta \int (g_{\alpha\beta}(r) - 1) \sin(kr) dk$		

4. ábra

merev, statikus állapotban észlelik, ellentétben a neutronsugárzással, amely a rendszer távolság- és energiaspektrumát is méri. Ezen alapszik a korszerű neutronspektroszkópia, amellyel ma már a molekulák vibrációs rezgései is tanulmányozhatók kondenzált fázisban.

A fentiek alapján a röntgen- és elektronszórás a folyadékok szerkezetére jellemző statikus strukturfaktort méri, és a korábban említett páreloszlás-függvények meghatározására alkalmas. Természetesen ha a rendszer több komponensű, mint molekuláris oldószerek és oldatok esetében, akkor a strukturfaktor a különböző párkölcsönhatások súlyozott összegét méri, amelyben a súlyokat az atomi szóráscentrumok szórási amplitúdóinak szorzatai képezik. Meg kell jegyezni, hogy az összeg felbontása általában nehézséget jelent a folyadékdiffrakciós adatok interpretálásában.

A modellezés megszokott volt pályám elején is. A modelleket számosságuk mellett az jellemezte, hogy a jelenségeknek csak egy szűk körét írták le. Létez-

A különböző sugárzásokat megkülönbözteti terjedési sebességük és energiacseréjük is az anyag molekuláival (4. ábra). A röntgenfotonok és elektronok egy 0,3 nm-es tartományon a molekulák vibrációs karakterisztikus idejénél nagyságrendekkel rövidebb idő alatt haladnak át, és energiájuk jóval nagyobb a rendszer energiaátmeneteinél. Ezért ezek a sugárzások a vizsgált rendszert



tek kölcsönhatási modellek, szerkezeti modellek, a molekulák mozgásállapotát folyadékfázisban leíró dinamikus modellek. Ezek a modellek egymástól elkülönültek, nem képeztek egységes egészet, a jelenségeknek csak egy szűk körét tudták magyarázni.

Ebben az időben uralkodó volt az az elképzelés, amely azt a tételt, hogy a folyadékok szerkezetét rövid távú rendezettség és hosszú távú rendezetlenség jellemzi, úgy értelmezte, hogy a folyadékok molekulái 10–100 molekulaátmérőjű, kissé relaxált rácsszerkezetű, rendezett halmazokba, klaszterekbe szerveződnek. A hosszú távú rendezetlenséget a halmazok felületén elhelyezkedő és a halmazok közötti monomer molekulák jelenlétével magyarázták. A folyadékok diffrakciós gyűrűinek diffúz jellege magyarázható volt a szerkezet mikrokristályos jellegével.

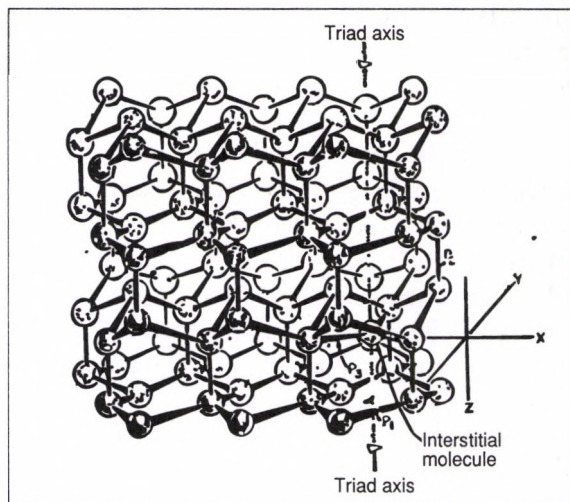
Az 1960-as években az oldatkémia egyik központi kérdése volt a víz szerkezetének a kérdése. Bár mindenki számára világos volt, hogy általában a folyadékállapotot rövid távú rendezettség és hosszú távú rendezetlenség uralja, a víz anomális tulajdonságai olyan konfliktust okoztak, amelyek akadályozták a két jellemző közti, a rövid távú rend és a hosszú távú rendezetlenség közti átmenet megértését.

Az egyik ilyen anomális tulajdonság a víz olvadáskor lejátszódó sűrűségnövekedés. Különös az is, hogy a folyadékállapot kiterjedt hőmérséklet-tartományon létezik. Ez hosszú távú erők jelenlétét sugallta. Igen kicsi a jég olvadáshője, ez csupán 15%-a a párolgáshőnek. Figyelemre méltó a víz kis kompresszibilitása is. A kompresszibilitás a repulzív erők mértéke. Talán a víz leg-anomálisabb tulajdonsága a nagy hőkapacitása, amely mintegy felére csökken mind olvadáskor, mind forráskor.

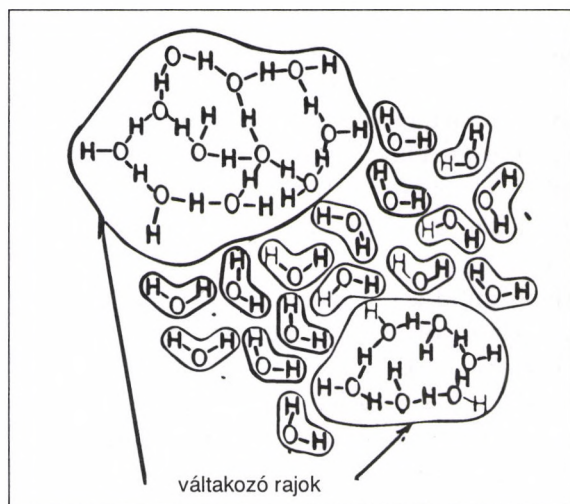
Ezek az anomális tulajdonságok mind azt sugallták, hogy a víz hosszabb távú rendezettséget örökölt a szilárdfázistól, mint a többi folyadék. Ezt a gondolatot tükrözte az 1960-as években kidolgozott nagyszámú szerkezeti modell mindegyike. A modellek egy részletes összefoglalója található Erdey Grúz Tibor 1971-ben megjelent könyvében. A számosságuk ellenére az akkori szerkezeti modelleknek volt néhány közös eleme.

Az egyik ilyen vonás volt az, hogy rövid távon, de néhány száz szomszédra kiterjedően, kisebb vagy nagyobb mértékben megőrizték a jég valamely módosulatának rendezett tetraéderes szimmetriájú szerkezetét, és a rendezetlenséget a jól rendezett térfogatrészek, klaszterek közötti elszakadt hidrogénkötésekkel képelték el.

Ilyen volt az 5. ábrán látható a folyadék egész térfogatára kiterjedő rácsmo-  
dell. A rácsból kiszakadt és a jégrács csatornáiban elhelyezkedő vízmolekulák, az ún. rácsközi vízmolekulák és a hibahelyek jelentették a rendezetlenség meg-



5. ábra



6. ábra

jelenését a modellben. Ilyenek voltak a klasztermodellek is, amelyekben a végső méretű, néhány száz molekulára kiterjedő, a jég valamely módosulatának szimmetriáját mutató, klaszterek közötti, elszakadt hidrogénkötések és a klaszterek felületéhez közel elhelyezkedő molekulák csökkenő, hosszú távú rendezettsége jelentette a rendezetlenség megjelenését a vízben.

Említésre érdemes még Némethy és Scherraga változórajok-modellje magyar vonatkozása miatt, de azért is, mert talán ez a modell áll legközelebb a jelenleg általánosan elfogadott modellekhez (6. ábra). Ebben a klasztermodellben a vízmolekulák közvetlen környezetére a tetraéderez szimmetria nem volt jellemző. Bár a klaszterekben domináns volt a molekulák négy hidrogénkötése, 3, illetve 2 hidrogénkötésű molekulák is előfordultak a klaszterek belsejében. A változó méretű rajok a monomerek tengerében

úsztak. Erre a modellre is jellemző volt a kétállapotú vízmolekula, a kötött és szabad vízmolekulák előfordulása.

Bár elképzelésünk a víz szerkezetéről az elmúlt negyedszázad alatt megváltoztak, a rácsmodellek tudományos jelentőségét nem szabad lebecsülnünk. Kísérleti tényekre épültek, és egy-egy anomális tulajdonságot kvantitatív



magyarázni lehetett segítségükkel. Az elszakadt hidrogénkötés fogalma is kísérleti spektroszkópai tényre épült.

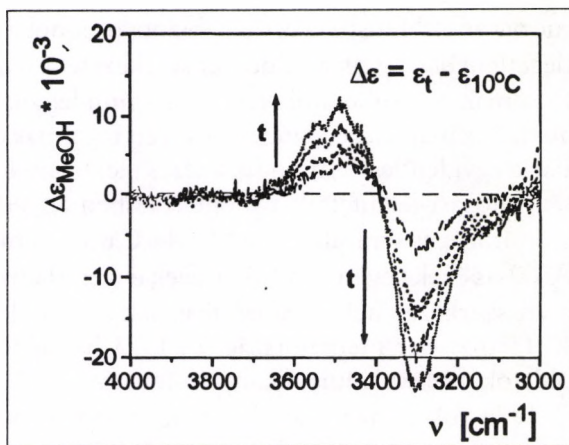
Az 7. ábrán a víz infravörös OH-nyújtási sávjának differenciaspektrumát láthatjuk a hőmérséklet függvényében a 10 °C hőmérsékleten felvett sávhoz viszonyítva. A jégben a rezgés sávja 3200 cm<sup>-1</sup>-nél jelenik meg, a gőzfázisú molekula sávja 3755 cm<sup>-1</sup>

hullámszámmal jelentkezik. A molekula nyújtási rezgéseinek sávjában gőz–folyadék fázisátmenetkor előálló vöröseltolódás jellemzője a hidrogén-hidas folyadékoknak. Folyadékállapotban, alacsony hőmérsékleten a sáv helye 3300 cm<sup>-1</sup>, de nagyfrekvenciás oldalán egy váll figyelhető meg. A hőmérséklet növelésével a nagyfrekvenciás járulékok intenzitása nő, a kisfrekvenciásé csökken. Ennek a ténynek a magyarázatára épült számos kétállapotú vízmodell, és épült az elszakadt hidrogénkötések fogalma. Itt kell megemlítenem, hogy az oldószer említett sávjai nemcsak a hőmérséklet hatására tolódnak el, de megfigyelhető a jelenség oldott anyagok hatására is, amely effektus alapozott meg olyan fogalmakat, mint az ionok szerkezetépítő és romboló hatása.

A spektrum intenzitásváltozásának analízisével egyszerű becslés volt tehető az elszakadt hidrogénkötések számára, a szabad vízmolekulák molarányára. Ezen becslés szerint a szabad molekulák száma növekszik a hőmérséklet növekedésével, 0–100 °C fok között, azonban az ilyen molekulák száma még a víz forráspontján sem haladja meg a molekulák 20%-át.

Elektrolitoldatok korai modelljeire az volt jellemző, hogy az oldószert kontinuumként kezelték. Ilyen volt a hidratáció Born-féle modellje vagy az elektrolitoldatok Debye–Hückel-modellje vagy az oldatok olyan rácsmodelljei, amelyekben az ionok oldatban, egy köbös relaxált rács pontjaiban helyezkedtek el a kontinuum oldószerben.

Ez idő tájt foglalkozta intenzíven az irodalmat az ionok osztályozása pozitívan-negatívan hidratálókra vagy szerkezetromboló és szerkezetépítő ionokra, aszerint, hogy az oldószer valamely tulajdonsága a nagyobb vagy az alacsonyabb hőmérsékleteken felvett értéke felé tolódott el az ionok hatására. Értel-



7. ábra



mezve az effektust azzal, hogy bizonyos ionok rendezettebbé, más ionok rendezetlenebbé teszik az oldószer szerkezetét a tiszta oldószerhez képest. Ezek a fogalmak rosszul definiáltak voltak, mindegyik szerző mást értett a fogalmak alatt. Ma már világos, hogy a nevezett fogalmak ellentmondásosak, és mindkét hatás egyidejűleg lejátszódik a vizes elektrolitoldatokban.

Változást jelentettek a modellezésben az 1960-as évek végén megindult számítógépes szimulációk a Monte-Carlo- és molekuladinamikai számítások. A '60-as évek végén és a '70-es évek elején Rahman és Stillinger megjelentette a víz szerkezetének és dinamikájának első molekuladinamikai számításait, és K. Heinzinger Németországban 1973-ban elkezdte tömény vizes elektrolitoldatok molekuladinamikai számításait.

1975 volt az az év, amikor magam is bekapcsolódtam az elektrolitoldatok molekuladinamikai modellezésébe K. Heinzinger meghívására, amely meghívást azért kaptam, hogy a diffrakciós kísérleti adataink alapján pontosítsuk a molekuladinamikai számításokat.

A számítógépes szimulációs módszerek elterjedése, a determinisztikus molekuladinamikai és a sztochasztikus Monte-Carlo-számítások eredményei, továbbá a folyadékdiffrakciós módszerek fejlődése szemléletváltozást hoztak létre a modellezésben. Úgy gondolom, hogy a két területen végzett munkánk eredményei hozzájárultak az említett szemléletváltozáshoz.

E szemléletváltozásnak két fontos eleme van. Az egyik annak a meggyőződésnek a megerősödése, hogy nincs elvi különbség az intermolekuláris és a kémiai kötést létrehozó erők között, a másik pedig az, hogy a folyadékokban a rendezetlenség lokálisan, már a molekulák közvetlen környezetében megjelenik, az intermolekuláris kötés geometriája torzult. Az intermolekuláris erők forrása is lényegében a molekulák, illetve fragmenseiknek Coulomb-kölcsönhatása. Az intermolekuláris kölcsönhatások három fontos típusa – a Van der Waals-kohézió, a hidrogénkötés, az elektronpár donor-akceptor kötés – közül talán a két utóbbi specifikus kölcsönhatás jellemzői között ismerhető fel legjobban a kémiai kötés két markáns attribútuma, az irányítottság és a sztöchiometrikus jelleg. A munkánk egyik fontos tárgyát képező hidrogénhíd-kölcsönhatás egy rövid távú molekulafragmensekre lokalizált kohéziós erő, amely perturbálja a partnerek kémiai kötését. A hidrogénkötés a donor protonja és az akceptor magános elektronpárja közötti kölcsönhatás. Az erősségét a donor pillératomjának elektronegativitása, irányítottságát az elektronpár molekulapályája, sztöchiometriáját az akceptor magános elektronpárjainak száma határozza meg. A hidrogénkötés energiája ( $10\text{--}40\text{ kJ mol}^{-1}$ ) nagyságrendben a kémiai kötés energiája ( $\text{H}_2$   $436\text{ kJ mol}^{-1}$ ) és a Van der Waals-kohéziós energiák ( $1\text{--}2\text{ kJ mol}^{-1}$ ) között áll. Az A–H...B hidrogénkötésben a proton és a B akceptor távolsága Van der Waals-



sugaraik összegénél rövidebb, az A–H kémiai kötés megnyúlik, rezgési frekvenciája vöröseltolódást szenved a perturbáció hatására.

A modern felfogás szerint a kémiai és intermolekuláris kötés minőségi hasonlósága alapján beszélhetünk az intermolekuláris kötés geometriájáról, átlagos kötéstávolságról, kötésszögről és rezgési amplitúdóról vagy a kötés élettartamáról. A kötés rezgési amplitúdója (0,01–0,04 nm) és élettartama (0,1 ps–2 ns) azok a jellemzők, amelyeknek nagysága megkülönbözteti az intermolekuláris kötést a kémiai kötéstől. A folyadékok intermolekuláris kötéseit által szerveződő molekulahalmazok egészének átlagos geometriája azonban már nem értelmezhető a halmaz elemeinek hőmozgás okozta nagy amplitúdójú torziós mozgásai miatt. A szupramolekuláris szerveződésnek, a szupramolekuláknak geometriai leírását a molekulahalmazok egyidejű kötéseit által kifeszített hálók átlagos topológiai jellemzése helyettesíti. A kötéshálókat változékonyság jellemzi, méretük fluktuál, elemeik cserélődnek. A folyadékszerkezet geometriai modelljeit statisztikus modellek váltották fel.

Az oldószerek és oldatok molekuladinamikai modelljei minőségileg eltérnek a korábbi oldatkémiai modellektől abban, hogy a kölcsönhatásokat, a szerkezetet és a dinamikát egységesen modellezzik, dinamikus modellek. A modell alapjaiban a molekulák kölcsönhatása áll, és ebből levezeti a rendszer összes tulajdonságát. Ez a levezetés a mai napig folyik, és az oldatok újabb és újabb tulajdonságai, egyensúlyi és nem egyensúlyi válnak számíthatóvá a kölcsönhatási energiákra alapozva. A molekuladinamika egy igen nagyszerű vonása, hogy a molekulák trajektóriáinak mozgásállapotának mindenkor ismeretében a jelenségek összefüggése szemléletessé, a molekulák láthatóvá tehető a számítógép segítségével, amint erre később példát is fogunk látni.

Néhány szót magáról a molekuladinamikai módszerről.

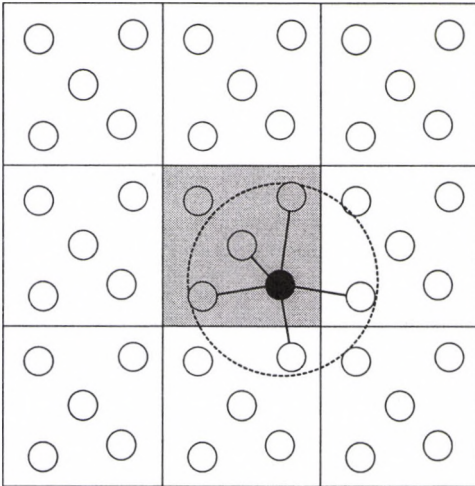
A molekuladinamikai szimulációk lényege elvileg igen egyszerű: a folyadék kiválasztott térfogatrészében a sűrűsége által meghatározott számú molekulát kölcsönhatási energiafüggvényekkel látunk el, és megoldjuk minden molekula klasszikus mozgásegyenleteit a többi által létrehozott potenciáltérben egy kis  $\Delta t$  időre előre (8. ábra). A  $\Delta t$  értékét úgy kell megválasztanunk, hogy ez kisebb legyen a rendszerben előforduló és tanulmányozni kívánt leggyorsabb mozgás karakterisztikus idejénél, és amely alatt feltételezhető, hogy a többi részecske potenciáltere állandónak tekinthető. Általában a  $\Delta t$  időlépés femtosecundum nagyságrendű vagy ennél kisebb, ha flexibilis belső erőkkal rezgésre készített molekulamodellekkel dolgozunk. Így előáll a rendszer  $\Delta t$  időközönkénti konfigurációinak sokasága. Számuk 50 000 és a több millió között lehet. Ezen a sokaságon a statisztikus fizika módszereivel a tulajdonságok különböző tér- és időátlagát vagy időfüggését is meghatározhatjuk.

$$\begin{aligned}
 m_i \frac{d^2 r_j(t)}{dt^2} &= F_j(t) \\
 F_i &= -\frac{d}{dr_i} \sum_{j \neq i}^N V_{ij}(r) \\
 I \frac{d\varpi_j(t)}{dt} &= M_i \\
 \frac{dr_i(t)}{dt} &= v_i(t) \\
 \varpi_i &= g(\alpha_i, \beta_i, \gamma_i)
 \end{aligned}$$

8. ábra

a modellrendszer méretét és a trajektóriák időbeli kiterjedtségét, hogy azok nagyobbak legyenek a részecskék korrelációs hosszánál, illetve a vizsgálni kívánt mozgás karakterisztikus idejénél.

A modellek részecskeszámja jelenleg 200–1000 között mozog, ami megfelel 2–3 nm oldalélű kocka alakú térfogatnak, és a számított molekulatrajektóriák hossza meghaladja 100–200 ps-ot. Kicsi a rendszer, rövid az idő? Számításokkal kimutatható, hogy számos szerkezeti és dinamikai tulajdonság pontos számításához elegendő, vannak azonban tulajdonságok, amelyek számításához nem elegendő.



9. ábra

A határfeltételek megválasztásával a vizsgált rendszer modellezésének alapjául a molekulák különböző statisztikus sokaságát választhatjuk.

Különböző szellemes számítástechnikai módszerek léteznek a határfeltételek megvalósítására. Végezhetjük a szimulációt állandó összes energia, térfogat és részecskeszám mellett, biztosíthatjuk az állandó hőmérsékletet, nyomást vagy kémiai potenciált is.

Felvetődik a kérdés: mekkora legyen a kiválasztott térfogatrész, hány molekula trajektóriáját határozzuk meg? A modell molekuláinak számát felülről minden esetben a számítástechnikai lehetőségek korlátozzák. Mindenesre úgy kell megválasztanunk

A kis méret miatt és a falhatás elkerülésére a számításokat periodikus határfeltételek között végezzük.

Ezt úgy érjük el, hogy a központi térfogatrészt minden irányban tükrösképeivel vesszük körbe, és a központi térfogatrészben elhelyezkedő bármely molekula azonos sugarú gömbön belüli részecskék potenciálterében mozog falhatás nélkül (9. ábra).

Másik kérdés: helyes-e, hogy klasszikus mechanikát használunk a rendszer trajektóriáinak előállítására (10. ábra)?



Szerkezeti tulajdonságok esetében erre a kérdésre a Broglie-hullámhossz és a molekulák karakterisztikus távolságának hányadosa alapján válaszolhatunk. Ha ez a hányados kisebb, mint egy, a rendszer jó közelítésben klasszikusnak tekinthető. Látható, hogy a hidrogén, hélium és talán a neon kivételével az oldatkémiában szerepet játszó folyadékok jó közelítésben klasszikusnak tekinthetők. A mozgásformák klasszikus vagy kvantumjellegének eldöntéséhez a termális energia Planck-állandóhoz mért viszonyát kell vizsgálnunk. Ez a hányados szobahőmérsékleten  $2,5 \cdot 10^{-14}$  szekundum értéket vesz fel. A folyadék molekuláinak translációs és rotációs karakterisztikus idői ennél az értéknél 2 nagyságrenddel nagyobbak. A vízmolekula OH-nyújtási rezgésének periódusideje azonban  $10^{-14}$  sec. Tehát flexibilis, rezgő molekulamodellek használata esetén a klasszikus számítást sok esetben kvantumkorrekcióval kell ellátni. Ez meg is történik például akkor, ha a víz vagy metanol belső energiájának és fajhőjének vibrációs járulékait számítjuk ki.

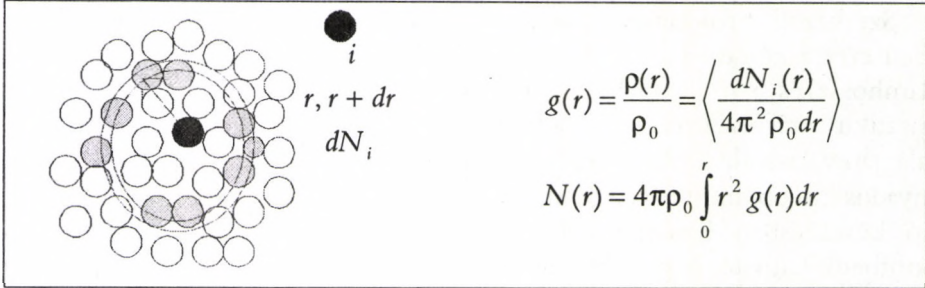
Néhány szót szeretnék még szólni a molekulamodellekről.

A számításokban biztosíthatjuk az egyensúlyi molekulageometriát merev kényszerekkel. Mód van arra is, hogy megengedjük a molekulageometria deformációját is, és szimuláljuk a molekula belső rezgéseit is. A molekula egyensúlyi geometriája körüli rezgéseket belső harmonikus vagy anharmonikus erők modellezésével állítjuk elő. Az erőállandók gázfázisú spektroszkópiai mérések normálkoordináta-analíziséből származnak. Ilyen molekulamodelleket használtunk a később bemutatandó víz, metanol és víz-metanol elegyek számításai során. Bár flexibilis molekulamodellek használata számítástechnikai nehézségeket jelent, nagy előnyük, hogy segítségükkel az oldószer-molekulák vibrációs spektruma is számítható, és tanulmányozható például az oldott anyagok, ionok hatása is a spektrumra.

*Klasszikus vagy kvantummechanika?*

SZERKEZET		
$\lambda = \left( \frac{2\pi h^2}{kTm} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \alpha \equiv \rho^{-\frac{1}{3}}$		
Folyadék	$T_1(K)$	$\Lambda/a$
H <sub>2</sub>	14,0	0,97
Ne	24,5	0,26
H <sub>2</sub> O	273,2	0,08
CH <sub>4</sub>	90,7	0,12
N <sub>2</sub>	63,3	0,11
Ar	84,0	0,08
Na	371,0	0,05
Kr	116,6	0,05
DINAMIKA		
$\tau = \frac{h}{kT} = 2,5 \cdot 10^{-14} s$		

10. ábra



11. ábra

### Dinamika

intramolekuláris rezgések  
transzláció  
rotáció

### autokorrelációs függvények

$$c_{AA}(t) = \langle A(0)A(t) \rangle_r$$

spektrális eloszlás

$$c_{AA}(\omega) = \int e^{i\omega t} c_{AA}(t) dt$$

sebesség-autokorrelációs függvény

$$c_{AA} = \langle v(0)v(t) \rangle_r \quad D = \frac{1}{3} \int_0^\infty c_{vv}(t) dt$$

12. ábra

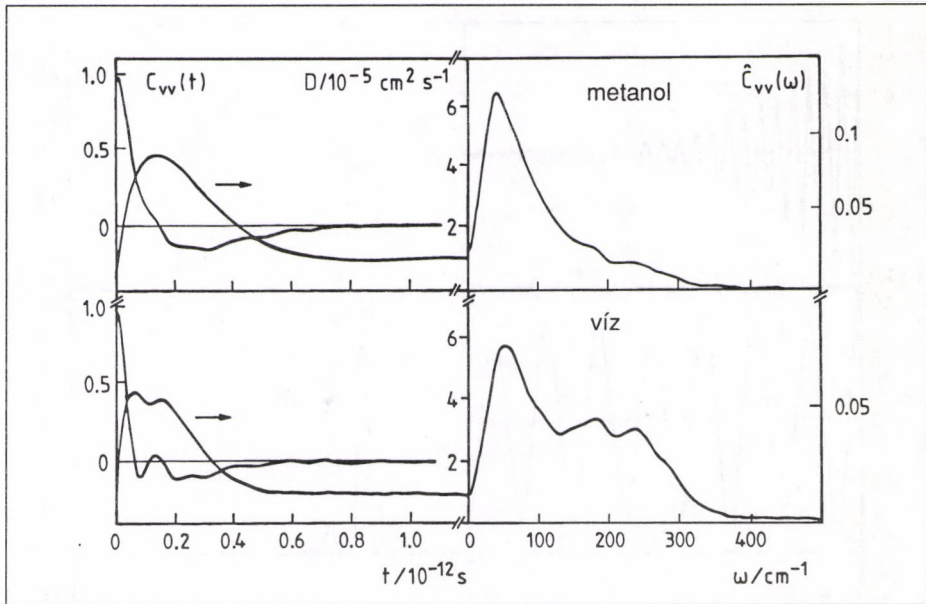
A páreloszlásfüggvények számítása a generált molekula-konfigurációk sokaságán egyszerű számítástechnikai feladat (11. ábra). Egyszerűen megszámoljuk a részecskék adott távolságban előforduló szomszédainak számát minden lehetséges részecsketípusra. Ezeket a számokat átlagoljuk az összes konfigurációra, ezzel előállt a pársűrűségek részecske- és időátlagja.

A molekulák dinamikájának számítása, mint említettem, időkorrelációs függvények segítségével történik (12. ábra). Az időkorrelációs függvényének Fourier-transzformáltja megadja a

dinamikai tulajdonság spektrális eloszlását. Tipikus példája az időkorrelációs függvényeknek a sebesség-autokorrelációs függvény.

A transzlációs szabadsági fokok autokorrelációs függvényéhez jutunk, ha a molekula tömegközéppontja sebességvektorának időkorrelációs függvényét állítjuk elő. A molekula öndiffúziós állandóját a Green–Kubo-reláció alapján az autokorrelációs függvény idő szerinti integrálja határozza meg. A sebesség autokorrelációs függvény Fourier-transzformáltja eredményezi a molekula transzlációs spektrumát, amely infravörös kísérleti adatokkal hasonlítható össze. A 13. ábra a metanol- és vízmolekulák sebesség-autokorrelációs függvényeit és transzlációs mozgásuk spektrumait mutatja be 3:1 víz-



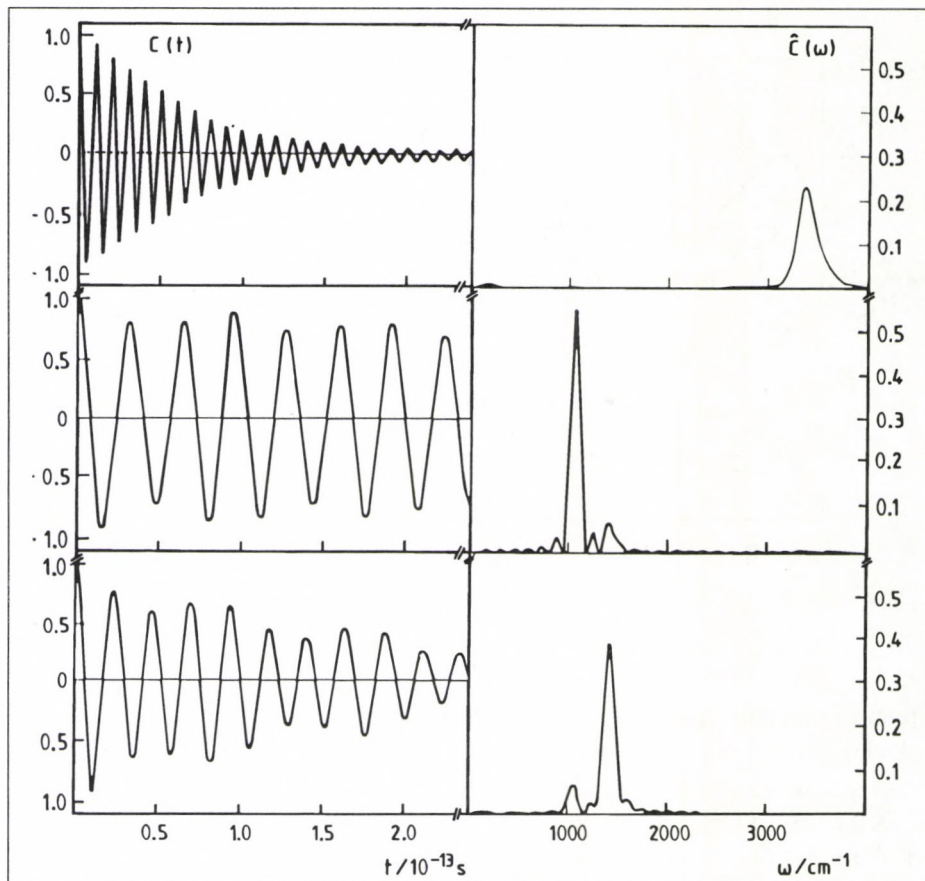


13. ábra

metanol elegyben, szobahőmérsékleten végzett molekuladinamikai számítások alapján.

Rezgő molekulamoddellel végzett szimuláció esetén közelítő normálkoordinátákat rögzítve a molekulához, előállíthatjuk a normálkoordináták sebesség-autokorrelációs függvényeit és a vízmolekula szimmetrikus/antiszimmetrikus nyújtási és hajlítási rezgéseinek spektrumát a modellben (14. ábra, metanol).

Korábban említettem, hogy a molekuladinamika egyik felmérhetetlen előnye dinamikus jellege. A másik az, hogy az átlagos, kísérletekkel összehasonlítható tulajdonságok számítása mellett, a koordináták és sebességek mindenkori ismeretében, a számított rendszerek molekuláinak a kísérlet által nem vagy csak pontatlanul mérhető egyedi tulajdonságai is számíthatóak. Így például megkülönböztethetők kationok, anionok hidrátszférájában vagy a tömbfázisban elhelyezkedő vízmolekulák és ezek járulécai egy adott tulajdonsághoz, de megkülönböztethetők például metanolban láncközi, láncevégi vagy monomer, hidrogénkötést nem alkotó molekulák is. Egyedi iontulajdonságok számításának minőségére mutat be példát a 15. ábra, amelyen egy- és kétértékű ionok hidratációs energiáit tüntetjük fel saját molekuladinamikai számításaink alapján (O), összehasonlítva azokat a kísérleti adatokkal (G) és a Born-modell alapján számított értékekkel (–).



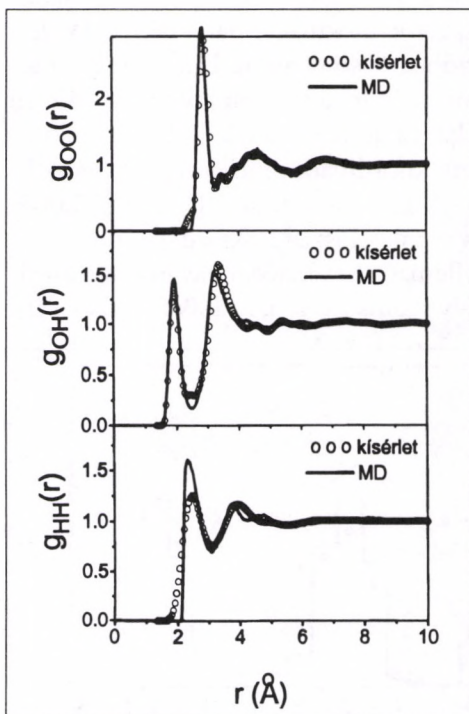
14. ábra

A következőkben az oldószerekben és oldatokban lokálisan megjelenő rendezetlenségre és a molekulák hosszú távú szerveződésére mutatok példákat saját munkáinkból. A példák molekulárisak lesznek, és alapjaik minden esetben szimulációkkal előállított molekula-konfigurációk voltak. A szimulációkról csak annyit említék, hogy a rendszerek számos fizikai-kémiai tulajdonságának reprodukciója mellett a konfigurációkon számított szerkezeti függvények minden esetben jól megegyeztek a diffrakciós kísérletekben mért szerkezeti függvényekkel.

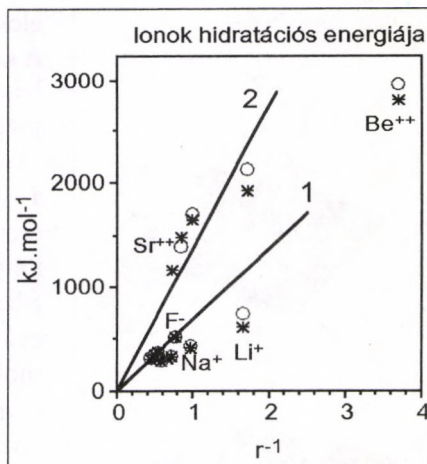
Ez utóbbira láthatunk példát a 16. ábrán, amely a vízmolekulák kísérleti és molekuladinamikai számításokkal meghatározott három az OO, OH és HH atomi páreloszlás függvényeit hasonlítja össze.



Kezdjük talán a példákat a vízmolekulák és az ionok elsőszomszéd-környezete szimmetriájának kérdésével vízben, illetve vizes elektrolitoldatokban. A korai vízmodellek többsége feltételezte, hogy vízben, a jéghez hasonlóan, a molekulák elsőszomszéd-környezete tetraédes szimmetriájú. A molekuladinamikai konfigurációk birtokában, az összes molekula koordinátájának ismeretében egyszerűen elvégezhető a szimmetriavizsgálat. Illeszszünk koordináta-rendszert a vízmolekulákhoz az origóval a tömegközéppontban. Legyen a  $z$  tengely iránya az antidipólus irányában, az  $y$  tengely erre merőlegesen a



16. ábra

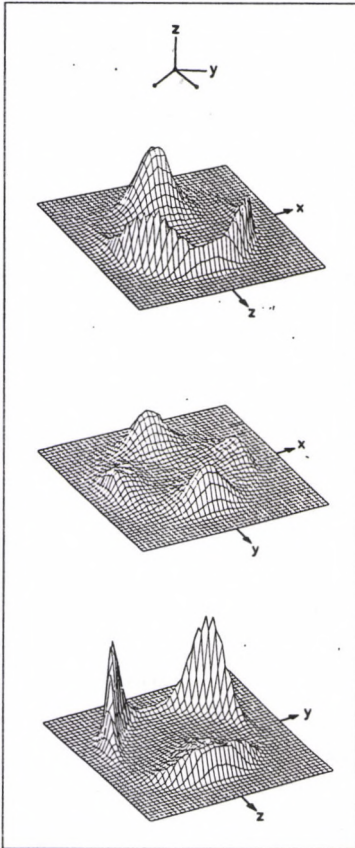


15. ábra

molekula síkjában és az  $x$  tengely merőleges a molekula síkjára. Vetítjük a koordináta-rendszer síkjaira a molekulák négy szomszédjának pozícióját, és átlagoljuk ezeket a vetületeket az összes molekulára. A szoba-hőmérsékletű víz molekuladinamikai modelljének három vetületeloszlását mutatja be a 17. ábra.

A vetületeloszlások tükrözik a tetraédes irányok kitüntettségét. Egy relaxált tetraédes szerkezet ezzel azonos eloszlásokhoz vezet. A felső ábra a szomszédok vetületeloszlását ábrázolja a molekula síkjában. A két csúcs a hidrogének irányába eső szomszédok vetületeivel, a harmadik a síkra merőleges magános elektronpár irányú szomszédok egybeeső vetületeivel azonosítható.

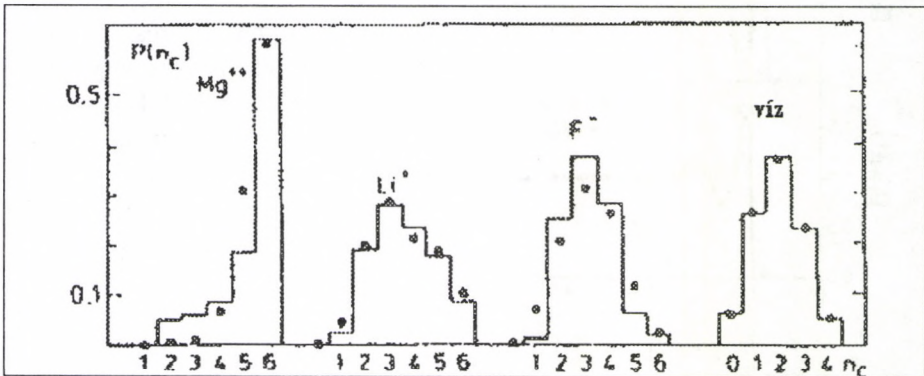
Az alsó ábra a magános elektronpár síkja az egybeeső hidrogén-szomszédok és felbomló magános



17. ábra

elektronpár irányú szomszédok vetületeivel. A középső a két előzőre merőleges ekvatoriális sík, és ezen mind a négy szomszéd vetülete megkülönböztethető. Bár a tetraédes irányok jól felismerhetők, nem elhanyagolható a vetületeloszlások szélessége. Ez utóbbi eredményezi azt, hogy a négy irány körül kinyitott 40 fokos kúpszögekben egyidejűleg átlagosan csak két vízmolekula tartózkodik, és a négy kúpszög egyidejű populációját a vízmolekulák csak kevesebb mint 10%-a valósítja meg (18. ábra, jobb oldal). Megállapíthatjuk, hogy az intermolekuláris kötés szögének eloszlása miatt a rendszerben a lokális környezet térbeli tetraédes szimmetriája erősen torzult.

Változatos az ionok hidrátzféráinak szimmetriája vizes elektrolitoldatokban. A 19. ábra az előzőhöz hasonlóan az kationok és anionok körüli hidratált vízmolekulák vetületeit ábrázolja az ioncentrumú hidrátzférákhoz rögzített koordináta-rendszerek ekvatoriális síkjain. A  $\text{Li}^+$  körül hidratált vízmolekulák átlagos vetületeloszlása oktaédes szimmetriára jellemző. Az oktaéder ekvatoriális síkjában négy szomszéd van, és a sík feletti és alatti

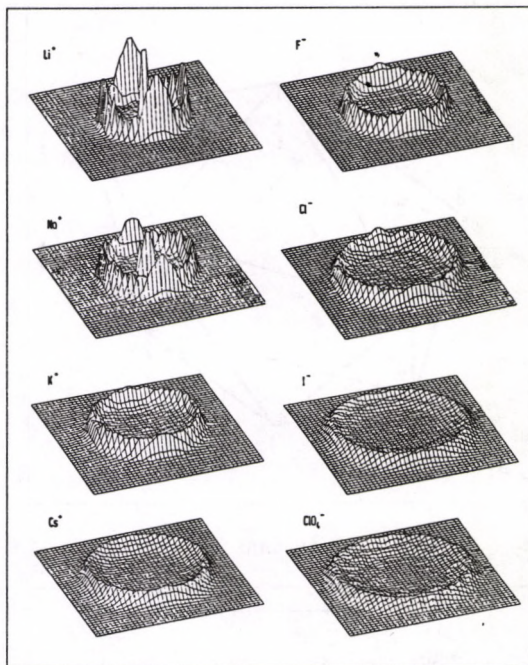


18. ábra

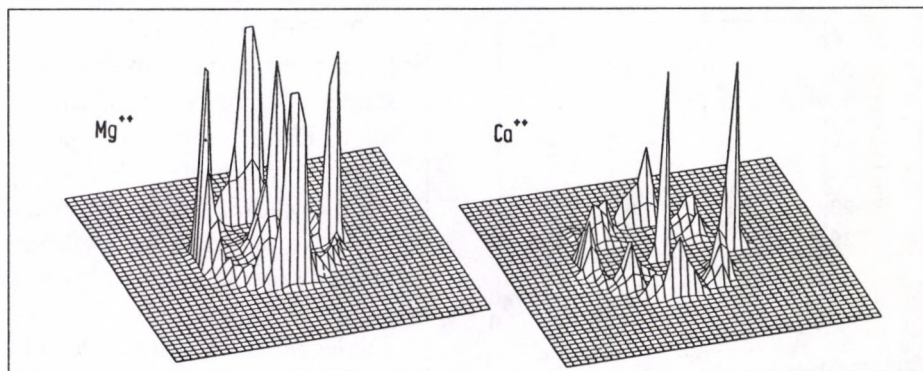


két szomszéd helyzete egymásra vetítődik. Az eloszlások szélessége a növekvő ionsugárral rohamosan növekszik, és az eloszlások elmosódnak. Az anionok hidratátszférájának szimmetriája nem ismerhető fel. Markáns oktaédes szimmetria figyelhető meg a kis sugarú  $Mg^{++}$ -ion hidratátszférájában (20. ábra). A vetületeloszlások éles csúcsokat mutatnak, a hat oktaédes irányba kinyitott 40 fokos kúpszögökben egyidejűleg az ionok 60%-ában találhatunk vízmolekulákat (lásd a 18. ábrát). A lítium esetében az ionok 10, a többi esetben ennél jóval kevesebb százalékában található egyidejűleg 6 vízmolekula az oktaédes irányokban. Mivel a legtöbb bemutatott ionnak hat a koordinációs száma, levonhatjuk azt a következtetést, hogy nem minden hatos koordinációs számú ionnak oktaédes a hidratátszférája.

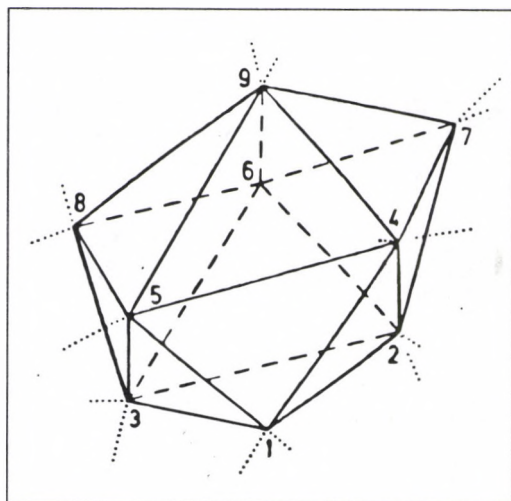
A kalciumionok hidratátszférájának különös közelítő szimmetriáit figyeltük meg a kalcium-klorid vizes oldatainak konfigurációiban (20. ábra). A kalcium-



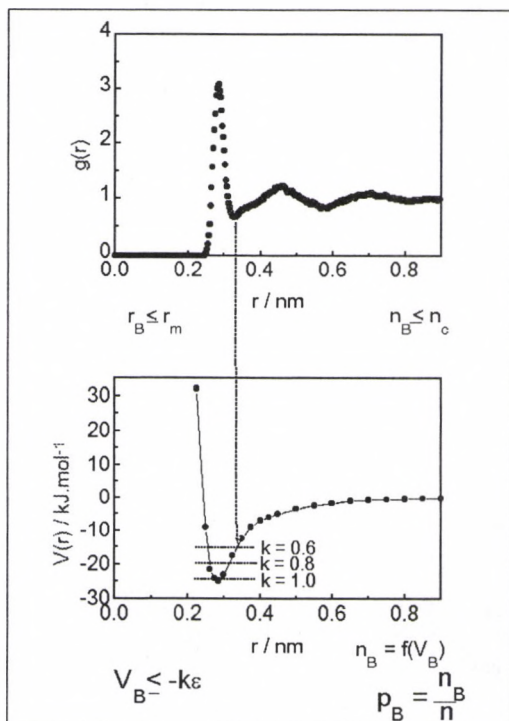
19. ábra



20. ábra



21. ábra



22. ábra

ionokat 9 vízmolekulával koordináló hidrátszféra olyan poliédert képez, amely szimmetriája, ha eltekintünk attól, hogy élei nem pontosan egyenlők ( $\pm 0,03$  nm), a  $D_{3h}$  pontcsoportba osztályozható. Megmutattuk, hogy ilyen poliéderek családja jön létre akkor, ha egy gömbfelületen elhelyezkedő 9 ponttól elvárjuk, hogy a pontok közötti legkisebb távolság maximális legyen (21. ábra). A kalciumionok hidrátszférájának szimmetriatorzulása a rövid távú rendezetlenség megvalósulásának sajátos esete.

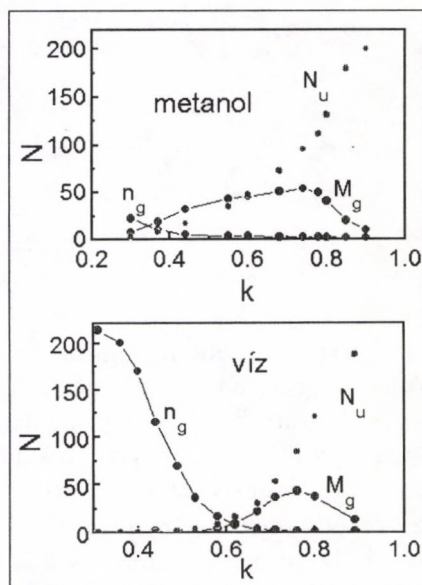
A bemutatott példákkal azt szerettem volna illusztrálni, hogy folyadékállapotban a lokális rendezettség széles skálán mozoghat, a molekulapárok kölcsönhatási energiájától függően. A térbeli szimmetriát megőrző szerkezetektől a csak kétrészecske-korrelációt fenntartó statisztikus szerkezetekig terjedhet.

Térjünk át most a téma második részére, a szupramolekuláris szerveződésre, a molekulahálókra. Ehhez először vizsgáljuk meg az intermolekuláris kötés definícióját (22. ábra). Az intermolekuláris kötés keletkezéséhez először szükséges, hogy a partnerek közvetlen szomszédok legyenek. A szomszédok eloszlását bármely centrális molekula körül a páreloszlásfüggvény



jellemzi. Az ábrán felül a víz oxigénjeinek páreloszlásfüggvényét láthatjuk. Az első csúcs, amelynek területéből kiszámítható koordinációs szám  $n_c=4$ , az első szomszédok elhelyezkedését jelzi átlagosan 0,285 nm-re a centrális molekulától. A csúcs után következő minimum  $r_m$  az első szféra határát jelzi. A hidrogénkötések száma maximálisan 4 lehet. Ez az első korlát. Definíálnunk kell továbbá az intermolekuláris kötés energiáját is. Az ábrán alul két vízmolekula kölcsönhatási energiáját láthatjuk távolságuk függvényében. A kötést definiálhatjuk a kötési energia valamilyen felső korlátjával  $V_c$ . Mondhatjuk azt, hogy azok a molekulák vannak kötésben, amelyek kölcsönhatási energiája a legmélyebb energia  $-\epsilon$  és  $V_c = -k \cdot \epsilon$  között helyezkedik el  $-\epsilon < V_c < V_c$ . A  $k$  0–1 közötti szám. A  $k$  korlátot 1-hez közel elhelyezve, a kötés erős, távol tőle gyenge definíciójához jutunk. A  $k$  függvénye lesz természetesen a kötések száma is, amely felső korlátja az előzőek alapján a koordinációs szám. Adott  $V_c$  energiakorláthoz tartozó kötések száma  $n_b$  és a maximális lehetséges kötések számának aránya meghatározza a kötés valószínűségét  $p_b$ , amely természetesen szintén a  $k$  függvénye lesz. Általában úgy járunk el, hogy variáljuk a  $k$  értékét 1 és a koordinációs szám által meghatározott értéke között, és vizsgáljuk, milyen következtetések vonhatók le a kötés definíciótól függetlenül. A definíció után az intermolekuláris kötésben álló molekulák hálójának számos topológiai tulajdonságát vizsgálhatjuk. A legfontosabb ilyen tulajdonság a hálók mérete, az egyidejű kötésben álló molekulák átlagos száma  $n_g$ .

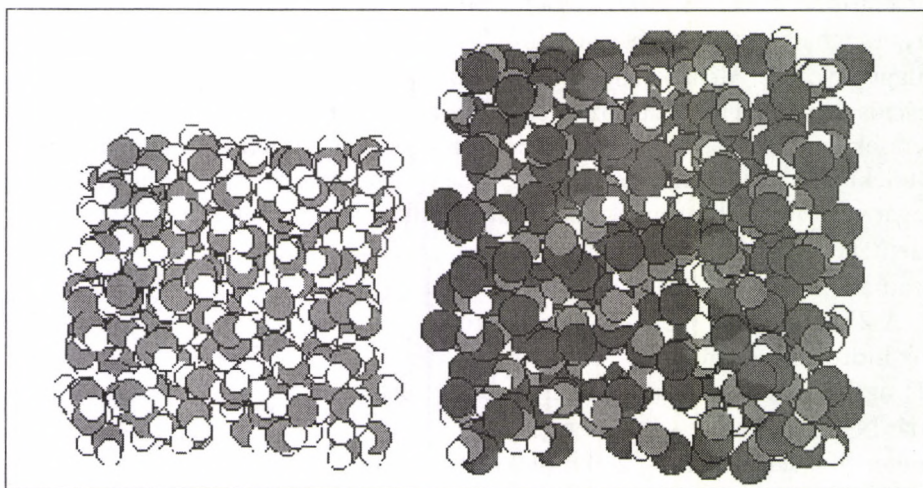
A 23. ábrán alul szoba-hőmérsékletű víz hidrogénhíd-hálóinak átlagos méretét  $n_g$ , számát  $M_g$  és a monomerek számát  $N_u$  láthatjuk a  $k$  kötésenergia-paraméter függvényében egy 200 molekulát tartalmazó térfogatrészben. A  $k$  paraméter értékének csökkentésével egyre kisebb energiával kölcsönható partnereket is kötöttek tekintünk. Látható, hogy a  $k$  csökkenésével a monomerek száma lecsökken, és a maximális kötési energia felénél, 2,5 átlagos kötőszám felett a hálóméret hirtelen megnő, és azt követően lefedi az egész rendszert. Mivel az egy molekulára jutó hidrogénkötések száma a legpesszimistább kísérleti becslés alapján is 2,5 felett van, meg-



23. ábra

állapíthatjuk, hogy a víz úgy tekinthető, mint egy tranzienst gél. Tranzienst azért, mert a kötések élettartama pikoszekundum nagyságrendű. Az erősen kölcsönható molekulák az egész térfogatra kiterjedő összefüggő hálót képeznek a molekuladinamikai modellekben.

A fentiekől eltérően viselkednek azonban a metanol molekulahálói (23. ábra, felül). A kötés definíciójának szigorításával itt is megindul a monomerek számának csökkenése, a hálóméret növekedése, de a leggyengébb kötésdefiníció esetében is – az összes elsőszomszédot (max 3) kötésben levőnek tekintve – a hálóméret véges marad, és nem haladja meg a 20 molekulára kiterjedő méretet. Az ok jól látható a 24. ábrán, ahol a víz és a metanol 200 molekulát tartalmazó molekulahalmazait láthatjuk. A metanolban a metilcsoportok hibahelyeket képeznek, gátolják a hidrogénkötéseket. A víz hálója kompakt és összefüggő, míg a metanol kötéshálói lazák és alhálókra esnek szét.



24. ábra

Meg kell említenem, hogy hasonlóan a metanolhoz, az N-metil-formamidban, a hangyasavban a hidrogénkötéses molekulahálók átlagos mérete szintén véges. Ugyanakkor azonban például a folyadék argon (81 K), az aceton, a dimetil-szulfoxid viszonylag erős intermolekuláris kötése a vízhez hasonlóan az egész folyadékra kiterjedő, összefüggő hálót alkotnak. A szupramolekuláris szerveződés tekintetében az olyan folyadékok az általánosak, amelyeknek molekulái térbeli intermolekuláris kötésre képesek, és azok a folyadékok a különösek, amelyekben az erős intermolekuláris kötések bizonyos irányokban gátoltak.



Végezetül egy igen fontos fizikai-kémiai tulajdonságról, az elegyek többlettulajdonságairól szeretnék beszélni. Ismeretes, hogy számos elegy többlettulajdonságai az elegyarány meghatározott értékénél szélső értéket mutatnak. Ez figyelhető meg a víz-metanol elegyeknél is 3:1 víz-metanol molaránynál. Szélső értéke van a moláris többlet-entalpiának, térfogatnak, izotermikus kompresszibilitásnak, maximális az állandó térfogatú fajhő, és minimális a víz- és metanolmolekulák diffúziós állandója.

Az 1. táblázatban a molekuladinamikai konfigurációkon számított moláris többletenergát és diffúziós állandókat tüntettem fel a kísérleti adatokkal összehasonlítva (a moláris entalpia számértékben alig különbözik a moláris energiától, a  $p dV$  kicsi, és csak a második jegyben okoz eltérést). Az energia maximuma és a diffúziós állandók minimuma 3:1 víz-metanol molaránynál figyelhető meg mindkét adatsorban. A többlettulajdonságok extremum viselkedését az irodalom általában valamilyen szerkezeti változással, pl. ciklikus dimérek keletkezésével vagy klátrá szerkezet kialakulásával magyarázza.

1. táblázat

Víz-metanol elegyek többlettulajdonságai

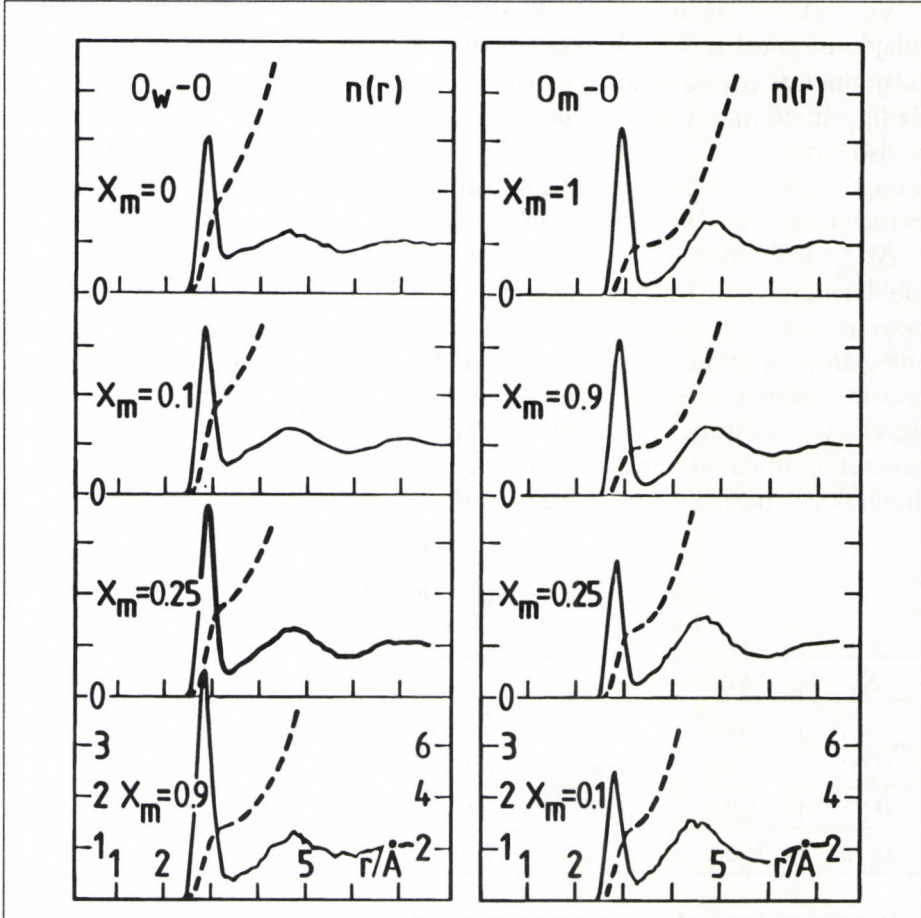
$$\Delta X = X - \alpha_v X_v - \alpha_m X_m$$

$X_m$	$-\Delta E$	$-\Delta H$	$-\Delta D_v$	$-\Delta D_v$	$-\Delta D_m$	$-\Delta D_m$
	$\text{kJmol}^{-1}$	kis	$10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$	kis		kis
0,10	0,33	0,60	0,40	0,60	1,20	1,11
0,25	1,06	0,90	0,60	0,90	1,50	1,33
0,90	0,22	0,26	0,43	0,62	0,40	0,46

Ezzel szemben ha megnézzük a molekulák térbeli eloszlását jellemző páreloszlásfüggvényeket (25. ábra), semmi specifikus nem látható, a változások a moltört függvényében folytonosak. Az első oszlop a vízmolekula oxigénjei körüli, a második a metanolmolekula oxigénjei körüli szomszédok oxigénjeinek páreloszlásfüggvényeit (Ow-O, Om-O) mutatja be, függetlenül attól, hogy ezek a szomszédok metanol- vagy vízmolekulák.

A metanol molarányának növelésével a vízmolekulák körüli oxigének korrelációja erősödik, az első csúcs amplitúdója nő, a koordinációs szám folytonosan 3-ra csökken. Fordítva, a metanol esetében, a vízmolekulák molarányát növelve a korreláció az első szomszédok között gyengül, a metanolmolekulák szomszédjainak átlagos száma 2-ről háromra nő.

Van azonban érdekesség az elegyek molekulahálóinak topológiai jellemzőiben (2. táblázat). A táblázatban szereplő adatok egy 200 molekulát tartalmazó



25. ábra

rendszerészre vonatkoznak. A kötés definíciójában a kötés energiája felső korlátja  $-15 \text{ kJ mol}^{-1}$  volt minden rendszerben azonosan, az összehasonlíthatóság miatt.

A víz-metanol elegyek moláris többlettulajdonságainak 3:1 molarány közelében fellépő szélső értékei egyszerűen magyarázhatók az elegyek molekulahálóiinak átlagos méreteivel. A vízhez metanolt adagolva háló-rekonstrukció indul meg, a molekulaháló összefüggőse erősödik, a hálóhibahelyek száma csökken. A 3:1 víz-metanol molarány közelében a rekonstrukció befejeződik, a hidrogénkötések száma maximális. Tovább növelve a metanolmolekulák arányát, a hálóhibahelyek száma növekedni kezd, a háló összefüggőse gyengül. Meta-



nalban gazdag elegyekben a hálók átlagos mérete már csak 10–20 molekula. A jelenséget a metanol–víz hidrogénkötések keletkezésének és metilcsoport hálóhibahelyek számát növelő hatásának versengése okozza. Számos más elegy többlettulajdonságainak szélsőértékei is hasonló módon értelmezhetők.

2. táblázat

*Hálóméret-eloszlás víz-metanol elegyekben*

$x_m$	$M_g$	$n_g$
0	2,5	81,3
0,10	1,5	139
<b>0,25</b>	<b>1,1</b>	<b>195</b>
0,90	9,6	21
1	32,1	5,8
A rendszerrészlet mérete 200 molekula		

A bemutatott példákban megfigyelhető jelenségek megerősítik azt a meggyőződést, hogy a folyadékokban a rövid távú rendezettség és hosszú távú rendezetlenség mellett jelentős szerep jut a rövid távú rendezetlenségnek és hosszú távú szervezettségének is.

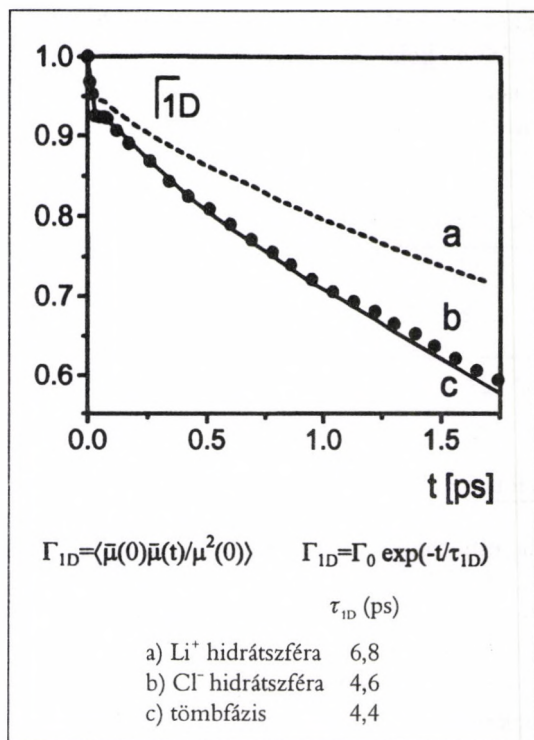
Előadásom végéhez közeledve engedjék meg, hogy néhány példán keresztül illusztráljam azokat a lehetőségeket is, amelyeket az oldatok molekuladinamikai modellezése nyújt számunkra az oldatok dinamikájának vizsgálatához.

Említettem korábban, hogy a molekuladinamikai modellek előállítják az oldatok speciereinek, az oldószer-molekuláknak és ionoknak sebesség-autokorrelációs függvényeit. A sebesség-autokorrelációs függvényekből számítható öndiffúziós állandók összehasonlítása a kísérleti adatokkal a modellek minőségének egyik próbája.

3. táblázat

Egyedi öndiffúziós állandók LiI vizes oldatában ( $c=2,2 \text{ mol} \cdot \text{kg}^{-1}$ )	$D_w$	$D_{Li}$	$D_I$	Víz-molekulák öndiffúziós állandói	$D_i$
MD	2,48	0,70	1,40	tömbfázis	2,85
Kis.	2,35	1,00	1,47	kation-hidrátzféra	1,33
( $10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ )				anion-hidrátzféra	2,67

Egy ilyen összehasonlításra láthatunk példát a 3. táblázatban, amely tömény LiI vizes oldat speciereinek számított és nyomjelzéses kísérleti technikával mért öndiffúziós állandóit tünteti fel. Láthatunk példát olyan egyedi tulajdon-



26. ábra

ságok számítására is, amelyek kísérletileg nem érhetők el. Nevezetesen, mivel a modellben a részecskék megkülönböztethetők, külön számítható mind a tömbfázisban, mind az ionok hidratátszférájában elhelyezkedő vízmolekulák öndifúziós állandója. Hasonló példát mutat be a 26. ábra is, amely a tömbfázisú és hidratált vízmolekulák dipólus autokorrelációs függvényekből számítható átlagos reorientációs időit tünteti fel. Ezek az egyedi részecsketulajdonságok fontos információt hordoznak a különböző környezetű vízmolekulák mozgásállapotáról.

Érdekes jelenséget figyelhetünk meg  $\text{NaCl}$  és  $\text{MgCl}_2$  sók metanolos oldatainak molekuladinamikai modelljeiben számított sebesség-autokorre-

lációs függvényeken (27. ábra). A sebesség-autóokorrelációs függvények első zérushelye azt az átlagos időt jellemzi, amely alatt egy adott részecske visszalökődés-mentesen mozog.

Ezt követően a függvény előjelet vált, a részecske mozgásának iránya megfordul.

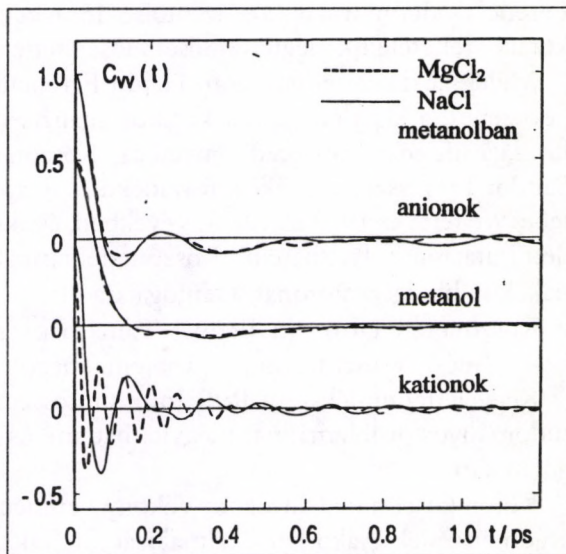
Összehasonlítva az ábrán az oldószer-molekulák és az ionok visszalökődéséhez szükséges karakterisztikus időket, megfigyelhetjük, a kationok – de különösen a kis ionsugarú  $\text{Mg}^{++}$ -kation – rezgő mozgását a szolvatált oldószer-molekulák üregében (cage).

Említésre érdemes az is, hogy a flexibilis molekulamoddellel dolgozó modell reprodukálja az oldószer-molekulák OH-nyújtási rezgéseinek erős vöröseltolódását  $\text{Mg}^{++}$ -kationok hatására (4. táblázat). Az intenzív kation–oldószer kölcsönhatás miatt fellépő jelenséget infravörös mérések igazolják.

Az előadásomban a rendelkezésemre álló idő alatt csupán a molekuladinamikai modellek néhány alapvető oldatkémiai problémára adott válaszát kísé-



relhettem meg ismertetni Önökkel. A számítógépes lehetőségek rohamos bővülése ma már lehetőséget ad az ismertett jelenségeknél jóval bonyolultabb, összetettebb oldatkémiai jelenségeknek modellezésére is. Számos eredmény született biológiailag aktív molekulák hidratációs jelenségeinek vizsgálatában, szelektív iontranszport modellezésében membránokban vagy határfelületi jelenségek értelmezésében. A lehetőségek bővülését jelzi a kvantumszimulációk megindulása is, amelyekben a klasszikus hipotézist elhagyva, a sokrészeske-rendszerek sűrűségmátrixainak időfüggését Monte-Carlo-módszerrel szimulálják.



27. ábra

4. táblázat

A metanolmolekulák rezgési sávjainak eltolódása ionok szolvátburkában

	OH ny.	COH h.	CO ny.
Tömbfázis	3344	1406	1045
Cl <sup>-</sup>	3368	1404	1045
Na <sup>+</sup>	3291	1407	1043
Mg <sup>++</sup>	3000	1440	1064
(cm <sup>-1</sup> )			

## Köszönetnyilvánítás

Előadásom végére érve szeretnék köszönetet mondani mindazoknak, akik hozzájárultak ahhoz, hogy munkámat elvégezhettem, és a Kémiai Osztály abban a megtsiszteltetésben részesített, hogy tagjai közé választott.

Talán az elsők között tartozom köszönettel legközvetlenebb munkatársaimnak, Kálmán Erikának és Karl Heinziger professzornak, akikkel a pályám elejétől kezdve a kutatás minden örömet és kudarcát együtt éltük át, és Márta

Ferenc akadémikusnak, aki az utolsó 15 évben kutatásainkat lehetővé tette, kutatási feltételeink megteremtését elősegítette, és a kutatásaimat ösztönözte.

Meleg köszönettel tartozom Hajdú Ferencnek, aki a tudományos pályára bevezetett, a kísérleti adatok kritikus analízisére nevelt, és számos ötletével hozzájárult munkám eredményeihez. Köszönettel tartozom néhai Lengyel Sándor professzornak, aki a folyadékdiffrakciós módszerek meghonosítását lehetővé tette az 1960-as 1970-es években, és akinek a tématerületen megkezdett kutatásait folytathattam. Köszönettel tartozom Holló János akadémikusnak, korábbi igazgatómnak a támogatásáért.

Köszönettel tartozom Radnai Tamásnak és Philippe Boppnak, akikkel hosszú időn keresztül számos probléma megoldásán együtt dolgoztunk.

Kegyelettel emlékszem Ruff Imre professzorra, kedves barátomra, akivel tudományos problémáimat megvitathattam, és több megoldásán együtt dolgozhattam.

Külön köszönettel tartozom Vékony Ferencnek, akivel kutatásaink számos eredményének gyakorlati alkalmazását megvalósíthattuk.

Köszönettel tartozom tanítványaimnak, elsősorban Bakó Imrének, továbbá többi közvetlen munkatársamnak, hazaiaknak és külföldieknek egyaránt, akikkel kutatásaim különböző szakaszában együtt dolgoztam, publikáltam, és így vitathatatlan az elért eredményeimhez való hozzájárulásuk.

Köszönet illeti a kísérleti munkában hosszú időn keresztül segítséget nyújtó munkatársaimat, Haklik Lajost, Eke Annát, Tarlós Évát és Lukácsy Magdolnát.

## Irodalom

- Hajdú, F., Lengyel S., Pálinkás G.: X-ray scattering and radial distribution function of liquid water. *J. Appl. Cryst.*, 9 (1976) 134.
- Pálinkás, G., Kálmán, E., Kovács, P.: Experimental atom pair correlation functions of liquid heavy water. *Mol. Phys.*, 34, (1977) 525.
- Pálinkás, G., Riede, W. O., Heinzinger, K.: Molecular dynamics study of aqueous solutions. *Z. Naturforsch.*, 32a, (1977) 1137.
- Pálinkás, G.: Comments on the tetrahedral structure of water. *Faraday Disc. Chem. Soc.*, 66, (1978) 147
- Szász Gy., Heinzinger, K., Pálinkás, G.: The structure of the hydration shell of the lithium ion. *Chem. Phys. Lett.*, 78, (1981) 154.
- Pálinkás, G., Radnai, T., Szász, Gy., Heinzinger, K.: The structure of an aqueous ammonium chloride solution. *J. Chem. Phys.*, 74, (1981) 3522.
- Pálinkás, G., Radnai, T., Dietz, W., Heinzinger, K.: Hydration shell structures in  $MgCl_2$  solution from X-ray and MD studies. *Z. Naturforsch.*, 36a, (1982) 1076.
- Pálinkás, G., Bopp, P., Jancsó, G., Heinzinger, K.: The effect of pressure on the hydrogen bond structure of liquid water. *Z. Naturforsch.*, 39a, (1984) 179.



- Pálinkás, G., Heinzinger, K.: Hydration shell structure of the calcium ion. *Chem. Phys. Lett.*, 126, (1986) 251.
- Pálinkás, G., Hawlicka, E., Heinzinger, K.: A molecular dynamics study of liquid methanol with flexible three-site model. *J. Phys. Chem.*, 91, (1987) 4334.
- Pálinkás, G., Hawlicka, E., Heinzinger, K.: MD simulation of water-methanol mixtures. *Chem. Phys.*, 158, (1991) 65.
- Pálinkás, G., Bakó, I., Heinzinger, K., Bopp, P.: Molecular dynamics investigation of the inter and intramolecular motions in liquid methanol and methanol-water mixtures. *Mol. Phys.*, 73, (1991) 897.
- Pálinkás, G., Bakó, I.: Excess properties of methanol-water mixtures. *Z. Naturforsch.*, 46a, (1991) 95.
- Pálinkás, G., Jedlovsky, P.: Network of strongly interacting atoms in liquid argon. *Chem. Phys.*, 185, (1994) 173.
- Jedlovsky, P., Bakó, I., Pálinkás, G.: Reverse Monte Carlo simulation of liquid water. *Chem. Phys. Lett.*, 221, (1994) 183.
- Bakó, I., Pálinkás, G., Heinzinger, K.: X-ray diffraction study of methanol-water mixtures. *Z. Naturforsch.*, 49a, (1994) 967.
- Pálinkás, G., Heinzinger, K.: Ion solvation in methanol. *ACH, Models in Chemistry*, 132, (1995) 5.

## Összefoglaló munkák

- Pálinkás, G., Kálmán, E.: Diffraction investigation of aqueous electrolyte solutions. In: *Diffraction Studies of Non-Crystalline Substances*. Eds.: Hargittai I., Orville-Thomas. Amsterdam, Budapest, Elsevier, Akadémia Kiadó, 1981.
- Heinzinger, K., Pálinkás, G.: Computer simulation of ion-solvent systems. In: *The Chemical Physics of Solvation, Part A*. Eds.: Dogonadze, R., Kálmán, E., Kornyshev, A., Ulstrup, J., Amsterdam, New York, Elsevier, 1985.
- Pálinkás, G., Kálmán, E.: X-ray, electron, and neutron diffraction studies of ionic solvation. In: *The Chemical Physics of Solvation, Part B*. Eds.: Dogonadze, R., Kálmán, E., Kornyshev, A., Ulstrup, J. Amsterdam, New York, Elsevier, 1986.
- Heinzinger, K., Pálinkás, G.: *Interaction of water in ionic hydrates in Interactions of Water in Ionic and Non-ionic Hydrates*. Ed.: Kleeberg K. Berlin, Heidelberg, Springer Verlag, 1987.
- Spohr, E., Pálinkás, G.: *Computer simulations of water interactions near single crystal surfaces in Interactions of Water in Ionic and Non-ionic Hydrates*. Ed.: Kleeberg, K. Berlin, Heidelberg, Springer Verlag, 1987.
- Pálinkás, G., Heinzinger, K.: Simulation of liquid mixtures. In: *Hydrogen Bond Networks*. Eds.: Bellissent-Funel, M. C., Dore, J. Kluwer Academic Publisher, 1994.





Szabadváry Ferenc

az MTA levelező tagja

# MAGYAR TUDOMÁNY- TÖRTÉNETI TABLÓ, ELŐTÉR BEN A KÉMIA

Elhangzott 1996. szeptember 17-én

**M**ár 1100 éve vagyunk itt a Kárpátok koszorújában. Szép teljesítmény, hiszen a Római Birodalom kb. ennyi ideig létezett egyáltalán. A mai európai országok között is csak néhány van, amelyik nálunk korábbi, s azok se sokkal. Kezdetben portyáztunk, raboltunk a tágabb környéken, túl az Enns folyón, Ober der Enns, ahol volt mit. Mesevilágunk emlékeztet erre, túl az Óperencián, Ober der Enns, ott szép a világ, így kezdődik máig számos mesénk. Nem is mindig saját szándékunkból mentünk, gyakran hívtak, egyik a másik ellen segítségül a németek urai közül. Hívásra mentünk 955-ben is, amikor a Lech-mezei csatában olyan katasztrofálisan megverték. Be kellett látnunk, hogy így nem megy tovább, csatlakoznunk kell, be kell illeszkednünk a nyugati fejlődésbe, s némi erőszakkal, a lakosság jó részének nem túl nagy lelkesedése, helyenként és időnként kirobbanó lázadása mellett hitet s társadalmi rendet változtattunk. Ezer éve megszületett a Magyar Királyság, a magyar állam!

Különös nemzet vagyunk! Nagy vereségeink köré csoportosítjuk történelmünket. Düsseldorfban volt módom egy Magyarországot sokoldalúan bemutató hivatalos kiállításunkon egy történelmi tablónkat látni, ahol kiemelt dátummal szerepelt az augsburgi, a muhi, a mohácsi csata, Világos, a két világ-háború és ezzel szemben állt, hogy Mátyás elfoglalta Bécset és visszavívtuk a

töröktől Budát. Nálunk van mohácsi és muhi pusztai emlékpark! Meg Szolimán-szobor Szigetvárott! De nem Párizsban, hanem Londonban van a Waterloo pályaudvar, Párizsban viszont Austerlitz pályaudvar van, s nem Bécsben vagy Szentpétervárott.

Am jönnek most a magyarországi tudományok! Jócskán bővebb e mondanivalóm, mint lenne, ha a Római Birodalomról kellene beszélnem. Ott bizony ezer év alatt e téren, mármint a természettudományok, a technika terén nem sok történt. Az írás, a háztartás, a háború és a közlekedés eszközei szinte alig változtak. A természettudás annál maradt, amit a görög filozófusok alkottak. Mindig érthetetlen volt számomra az a felvilágosodás korában született és máig élő nézet, amelyik a középkort az ókorhoz képest visszafejlődésnek, „sötét”-nek deklarálta, jóllehet a tudományos-technikai fejlődés ahhoz képest igen nagy haladást mutatott. A tudományos-technikai forradalom bizony már a középkorban kezdődött, és azóta megszakítás nélkül egyre csak tart és gyorsul, napjainkban már kissé ijesztően, már egy emberi életben is alig követhetően.

Magyarországon a természettudományok terén a kémia jelent meg legkorábban. A kémia elnevezést legelőször egy Nagy Konstantin császár idejében élt, Julius Maternus Firmicus nevű szicíliai asztrológus könyvében találtam, melyben a Szaturnusz évében születetteknek többek között a kémikusi pályát ajánlotta. Ez alatt ő az Egyiptomban született alkémiát értette. A név is onnan származik. A fáraók nyelvén ugyanis Keminek hívták ezt az országot. Az al névelőt az arabok tették hozzá. Nálunk azonban nem alkémia, hanem próbázás néven, vagyis analitikai kémiaként jelentkezett a nemesfémbányászat keretében. Magyarország a középkorban Európa legjelentősebb aranytermelője volt.

Károly Róbert király 1342-ben részletesen szabályozta az arany-ezüst termelés dolgát. Rendeletében olvashatjuk:

„Határozzuk továbbá, hogy a városokban legyen egy királyi ház, ahova az aranyat és ezüstöt eladás, beolvasztás és beváltás céljából mindenkinek be kell adni. Meghagyjuk azt is, hogy másutt, mint a királyi kamarában, senki se merje megvizsgáltatni, hogy hány karátos az ő aranya, hanem a királyi próbázónak kell a királyi házban ezt a vizsgálatot megejtenie és az aranyra a karátokat és királyi jegyünket rányomni...”

Itt kétségtelenül analitikai vizsgálatról volt szó, tűzpróbáról, azaz kupelációról. Ezt bizonyítja, hogy a rendelet intézkedést tartalmaz az aranyvizsgálathoz szükséges ólom beszerzésének módjáról is.

Zsigmond király 1405-ben szintén kiadott egy a pénzügyekkel foglalkozó rendeletet. Van benne egy passzus, amelyik a mi szempontunkból szintén



érdekes. Megtiltotta, hogy ezüst öntésére vagy vegyítésére alkalmas edényt vagy eszközt bárki is tartson, csak azok, akiket az aranynak ezüستől vízzel való elválasztás tiszttségével megbíznak.

A víz itt nyilván salétromsavat jelent. Ez tehát már egy nedves úti analitikai művelet ismeretét jelenti.

A középkor végén tűnt fel Thurzó János, a kornak talán legjelentősebb technológusa és vállalkozója, a korai kapitalizmus hazai első képviselője. Ő hozta létre a 15. század végén Európa egyik legjelentősebb bánya-kohó vállalatát. Egy maga által konstruált vízkiemelő szerkezettel segített vízteleníteni a Felvidék bányáit, megvásárolt vagy bérbe vett számosat. Valószínűleg Velencében lesett el egy eljárást a rézércből az ezüst kinyerésére, amire addig itthon nem voltunk képesek. Kapcsolatba lépett Európa legnagyobb bankárával, az augsburgi Fugger Jakabbal. Meggyőzte őt egy hazai rézkohó építéséről. Jelentős hitelt kapott, amelyből 1494-re el is készült Besztercebányán az új kohó. Később családi összeköttetés alakult ki a két család közt. Fugger fiú Thurzó lányt, Thurzó fiú Fugger lányt vett el. E bánya-kohó birodalom mintegy 5000 alkalmazottal működött. A Fuggerek lelkiismeretes és már arab számjegyekkel vezetett könyveléséből megtudhatjuk, hogy pl. az 1523. évi magyarországi nyereségük 100 000 aranyforint volt, ez kb. elérte a királyi kincstár évi bevételének felét. Később a Thurzó-utódok a magyar főnemességben játszottak szerepet, még nádor is került ki közülük. A Fuggerek pedig Buda török általi elfoglalásától megriadva 1546-ban kivonultak a Korona javára a magyar üzletből. Működésüknek a magyar nyelv állított emléket a „fukar” szóval.

A tudományok eredményei és ezek megmaradása írásbeliséget igényel. Ebben pedig nagyon rosszul álltunk. Mint az oklevelekből látható, még korai királyaink se tudtak írni, aláírásuk ábraszzerű rajzolat volt. A 14. századtól kezdve azonban a főnemesi sarjak már gyakorta tűntek fel a párizsi, még inkább az olasz egyetemeken, és váltak írástudókká. Az egyetemek arab eredetű oskolák, melyeket a móroktól vett át a 13. századtól kezdődően Nyugat-Európa és Itália, majd a 14. században Közép-Európa. Legkorábbi itt a prágai egyetem volt 1348-ban, majd Bécs 1356-ban, Krakkó 1364-ben, és mint ismeretes, Nagy Lajos király Pécsen 1367-ben alapította országunk első egyetemét. Ellentétben a többi felsorolttal, melyek máig működnek, a pécsi egyetemről nem sokat tudunk. Egyes források szerint addig működött, amíg a török el nem foglalta a várost, de ez nem nagyon valószínű, mert különben miért alapított volna Zsigmond király 1396-ban egy újabb egyetemet Óbudán. Erről még kevesebbet tudunk, azt is csak a vatikáni adatokból. Például azt, hogy a konstanzi zsinaton részt vettek az óbudai egyetem képviselői, s egyikük tagja volt a Husz Jánost máglyára ítéző egyházi bíróságnak. Mátyás király, jobban mondva Vitéz János



esztergomi érsek 1467-ben Pozsonyban alapított újra egyetemet. Ez sem működött sokáig, jóllehet itt olyan nagy tudós is tanított, mint Regiomontanus, a híres csillagász, aki Magyarországon írta egyik leghíresebb könyvét, amelyet Vitéz Jánosnak ajánlott, továbbá Bylica de Ilkusz lengyel csillagász, aki Mátyás király számára nagyon szép csillagászati műszereket készített, melyek a krakkói egyetem múzeumában máig láthatók. Ennek az egyetemnek bukásában valószínűleg része volt a Mátyás király és Vitéz János között később kialakult konfliktusnak. Nehéz okát találni annak, hogy miért buktak meg az egyetemek nálunk éppen Magyarország történelmi fénykorában!

Magyarországon Zsigmond és Mátyás alatt valóban beköszöntött a Nyugat, a reneszánsz kultúrája és művészete. Tudjuk, számos neves külföldi művész, író és technikus járt és tartózkodott és alkotott országunkban, főleg a királyi meg a püspöki udvarokban. Úgy tűnik azonban, hatásuk is csak ezekre terjedt ki.

A középkor nagy találmányai rendre megjelentek. Fogyasztottunk már cukrot, volt puskapor, ismertük az ásványi savakat, vízikerekek hajtották a malmok jó részét. Egyes templomaink tornyán toronyóra jelezte az időt. Joggal feltételezhető, hogy Mátyás, e reneszánsz uralkodó palotájában már asztali órák is működtek. S uralkodása alatt megjelent az országban a középkor legnagyobb találmánya, a könyvnyomtatás is. Alig két évtizeddel Gutenberg első nyomdája után telepedett le Budán Hess András német vándor nyomdász, és nyomtatta ki 1473-ban a *Chronica Hungarorum*-ot. Túl büszkének nem kell erre lennünk, hiszen a könyvnyomtatás példátlan gyorsasággal terjedt a világon, és a 15. század végén Európa 260 városában már 1100 nyomda működött, jelezve, hogy a technikai transzfer már akkor is rohamos, csupán csak olcsóbb volt, mint manapság. Hess András nyomdája különben is nagyon rövid életű volt. Vajon a gyönyörű, kéziratos corvinákra temérdek pénzt áldozó Mátyás király feltehető érdektelensége az új és korántsem olyan szép műveket előállító nyomda iránt ez esetben nem volt ennek egyik oka? Így azután az első magyar nyelvű szöveget nem Magyarországon, hanem Krakkóban nyomták 1527-ben. Ugyanebben az évben Nagyszebenben, tehát hosszú fél évszázaddal az első után, megkezdte működését egy második nyomda, melyet 1537-ben a Nádasdy Tamás alapította harmadik követett Sárovaron, ahol két év múlva kinyomtatták az első magyar nyelvtant. Most már sorra alakultak a nyomdák, a század végére már 100 körüli volt számuk Magyarországon. Ebben nagy része volt az akkori hitvitáknak. Mindegyik vallás fokozott figyelmet fordított – hogy úgy mondjam – a szellemi káderek képzésére: itt is, ott is alapították a megfelelő képzést biztosító iskolákat, főiskolákat, melyek közül nem egy máig is működik, s büszkén tekinthet vissza múltjának eredményeire. Az új nyomdákban meg seregestül nyomták a hitvitázók gyönyörű szép magyar nyelven



írt, példátlanul goromba könyveit, melyek ennek ellenére oly nagy mértékben járultak hozzá a magyar irodalom megszületéséhez.

Magyarország első térképét is külföldön, a bajorországi Ingolstadtban nyomtatták 1528-ban. Tervezője bizonyos Lazarus Secretarius volt, aki feltehetően, de nem bizonyítottan az esztergomi érsekség munkatársa lehetett. A következő térképet Honterus János készítette 1532-ben Erdélyről, bizonyítván, hogy a térképészethez, geodéziához is értettek már akkor hazánkban.

Az újkor beköszönté egy három részre szakadt Magyarországot talált, mely állapot igazán nem segíthette elő a tudományos életet. A 17. század ilyen szempontból eléggé elveszett évszázada volt hazánkban. Pedig nyugaton éppen ez volt a modern természettudományok kialakulásának és fellendülésének korszaka. Ekkor élt és alkotott Kepler, Descartes, Galilei, Stevin, Guericke, Boyle, Huygens, Newton, Leibniz stb.

Amint említettem, ebben a században alakultak mind a híres protestáns kollégiumok, mind a jezsuita iskolák, beleértve az 1635-ben Pázmány Péter alapította egyetemet Nagyszombatban. Sajnos ennek csak két fakultása volt, a teológiai és a filozófiai.

Ezekben az iskolákban a bölcsészet keretében azért a természettudományok körébe eső kérdésekkel is foglalkoztak. S megjelentek szép számban szakkönyvek is, többnyire latinul, de például 1577-ben jelent meg az *Aritmetica*, az az, *A Szamvetesne Tudomania, mell' az tudos Gemma Frisiusnac Szamvetesbeol magyar nyelvre* (ez tudománban gyönyörködöknec hasznokra, es hamaráb való értelmece io moddal) fordítatott című, általában debreceni aritmetika néven ismert könyv. Apáczai Csere János 1653-ban megjelent *Magyar Encyclopaedia* azaz *a minden igaz és hasznos böltseségnek szép rendbe foglalása és magyar nyelven világra botsátása* című műve számos körünkbe tartozó korabeli nézettel, dologgal is foglalkozott.

Melius Juhász Péternek, a harcos református hitvitázó püspöknek *Herbárium, az fáknak, füveknek nevekről, természetekről és hasznairól...* című, Kolozsvárott 1578-ban megjelent könyve a botanika első magyar nyelvű munkája. A latin nyelvű könyvek közül nem egy külföldön is ismertté vált, erre példa Wernher György eperjesi orvos Bázelen 1549-ben megjelent, *De admirandis Hungariae aquis* című könyve, amelyik több további külföldi kiadást ért meg. E könyv ásványvizeink első ismertetését tartalmazza, s a kémiának, geológiának és orvoslásnak körébe sorolható.

Meg kell említenem itt az első világraszóló magyarországi találmányt: 1627. február 8-án Weindl Gáspár selmezbányai bányamester, korábban tüzér Montecuccoli tábornok seregében, a világon először végzett bányakna-mélyítést puskaporos robbantással.



A 18. század minden téren a fejlődés, a korszerűsítés, mondhatnám a sikeres modernizáció kora volt Magyarországon. Ennek vezérlése Bécsben történt, ahol a már csak címet jelentő Német-római Császárság helyett a sajátos osztrák kameralizmus jegyében egyre jobban a Duna mentére támaszkodó Habsburg-uralom a felvilágosodás eszméit is tekintetbe véve próbálta saját szűkebb, korszerűbb birodalmát kialakítani.

Történetírásunk, különösebb régibb történetírásunk egyértelműen haragudott Mária Teréziára, rá és szükségszerű vámrendelkezéseire vezetve vissza minden későbbi elmaradottságunkat. A tudomány, a technika, a gazdaság felől közelítve a történelemhez, bizony más kép adódik.

A 18. század jelentős fejlődést mutat országunkban, nemcsak demográfiai-lag, hanem számos más tekintetben is. Köszönhető ez elsősorban annak a ténynek, hogy történelmünk egyetlen évszázada ez, amelyben az ország területén nem volt háború, de annak is, hogy felülről sok helyen reform kezdeményeztetett, sőt végrehajtatott, különösen Mária Terézia idejében, aki finom asszonyi ösztönrel, diplomatikus érzékkel, megfelelő körültekintéssel sikeresen folytatta a modernizálást. Minden szükséges modernizáláshoz kell ez a képesség, mert szükségszerűen minden ilyen törekvés beleütközik a hagyományokba. S ha túl türelmetlenül teszi valaki, mint tette pl. II. József, akkor bele is bukik. Lehet, hogy nem értenek velem egyet, de én Mária Teréziát egyik nagy uralkodónknak tartom.

Az országot, mármint Magyarországot rendbe kellett tenni. De felismerte a kormányzat, hogy ezt az oktatásnál kell kezdeni! Már III. Károly alapított 1735-ben Selmecebányán egy bányatisztképző iskolát. Első vezetője Mikoviny Sámuel, a jeles földmérő és térképkészítő szakember volt. Evvel az addig kötetlen, inkább mesterség jellegű bányászszakember-képzést kötött, iskola-rendszerű bányatisztképzéssé alakította át. Az iskola tanulóinak, az expektánsoknak hat szakból kellett vizsgáznia, s utána állást nyertek a kamarai bányákban. A bányák csak ilyen végzettségűeket vehettek fel bányatisztnak. A tanítást a bánya szakemberei végezték. A hat szak egyike volt a próbázás, vagyis az analitika, jelen esetben természetesen a fém- és ércvizsgálat. A próbázási gyakorlatokat a hallgatók e célra létesített próbaboratóriumban végezték. Részletesen leírták 16 pontban, hogy milyen vizsgálatokat kell végezni. Csak például: 3. Az ércek és kőzetek, kéneskő, fémeskő, ónérc, ón, ólom, rézkő, feketerez próbavétele ezüstre. 9. Aranyércek próbavétele, továbbá az arany és ezüst oldása és elválasztása. Igen széles körű volt tehát a program, az alkalmazott módszereket nem ismerjük, csak feltételezhetjük, hogy forrasztócsöves minőségi módszerek lehettek, míg a nemesfémeknél már mennyiségi meghatározások is szóba jöhettek.



1763-ban akadémia rangjára emelte Mária Terézia az intézményt. Első tanszéke a kémiai és metallurgiai tanszék volt. Első professzora a vallon orvos, Nicolas Jacquin, széles körű elméleti érdemeket szerzett a kémiában. Az olasz orvos Giovanni Scopoli, a második professzor inkább ásványtannal foglalkozott. A harmadik, Ruprecht Antal már magyarországi születésű volt és az akadémián tanult. Az ő professzorsága (1778–1792) volt a nemzetközi hírnévre és látogatottságra emelkedett főiskola fénykora. Ruprechtnek szerepe volt a tellúr felfedezésében. Mint ismeretes, a tellúr az egyetlen Magyarországon felfedezett kémiai elem. A felfedezés az osztrák születésű Müller Ferenc erdélyi bányaigazgató nevéhez fűződik, aki korábban ugyancsak Selmecbányán tanult. 1784-ben fejeződött be az a vita, amely 1782-ben kezdődött egy erdélyi aranyérc vizsgálatával, melyben Ruprecht antimont vélt találni. Müller ezt cáfolta és bizmutnak vélte. A vita a Bécsben megjelent *Physikalische Arbeiten der einträchtigen Freunde* című folyóirat hasábjain folyt még tovább, és Müller azon megállapításával végződött, hogy itt egy addig ismeretlen új elemről van szó. Ezt abból következtette, hogy tömény kénsavban mind az érc, mind a fém kárminvörös színnel oldódik, ami az addig ismert elemek egyikére sem volt jellemző.

A selmecbányai akadémia mindenképpen a kémiai laboratóriumi oktatás bölcsője volt, s ez szolgált mintául az 1794-ben alapított párizsi École Polytechnique-nek. Idézzünk a párizsi konventben elhangzott és megjelent alapítási javaslatból:

„A fizikát és kémiát eddig csak elméletben tanították Franciaországban. A selmeci bányászati iskola Magyarországon csattanós példát mutat nekünk arra, hogy milyen hasznos, ha a hallgatók a gyakorlatban is elvégzik azokat a műveleteket, amelyek a hasznos tudományok alapjait képezik. Ott laboratóriumokat nyitottak, melyeket felszereltek a szükséges anyagokkal és eszközökkel, hogy azokban minden hallgató megismételje a kísérleteket, és saját szemével győződjön meg mindama jelenségről, amelyek a testek egyesülésekor megnyilvánulnak.

A Közjóléti Bizottság úgy gondolja, hogy a felállítandó közmunkák iskolájában is ezt a módszert kellene bevezetni, melynek kettős előnye, hogy egyrészt minden érzetükkel egyszerre követik a diákok a tanítást, másrészt felhívja a figyelmüket egy sereg olyan körülményre, amelyekről az előadásokon majdnem mindig elterelődik vagy a professzor, vagy a hallgatóság figyelme. A hallgatókat speciális termekbe osztják majd be, ahol megismétlik az ábrázoló geometria azon feladatait, melyeket a tantermekben tanáraiktól hallottak, speciális laboratóriumokban pedig elvégzik a kémia legfontosabb műveleteit, és így majd megszokják, hogy a legegyszerűbb kivitelezési módot keressék, és a termékeket a legtokéletesebb módon állítsák elő.”



A kétfakultású nagyszombati egyetemet később Lippay primás jogi karral egészítette ki. Mária Terézia meg 1770-ben orvosi fakultást is szervezett. A klasszikus négy egyetemi kar közül feladatainál fogva is az orvosi kar állt legközelebb a természethez. Érthető, hogy a modern természettudományok korai művelői főleg orvosok voltak mindenütt. Az orvosi kar megalapítása hazánkban is nagymértékben járult hozzá a természettudományok, ezeken belül elsősorban a kémia fejlődéséhez. Az egyetem első tanszéke, a kémia-botanikai tanszék 1770-ben alakult. Első professzora az osztrák származású Winterl Jakab orvos lett, akkor éppen Selmezbányán fő bányorvos. 1777-ben a királynő az egyetemet Budára, a királyi Várba, onnan meg 1782-ben II. József Pestre helyezte. Winterlnek jutott tehát szervezésből és tanszékberendezésből elég, háromszor kellett ezt megtennie. Winterlnek jeles érdemei vannak a magyarországi kémiai tudomány kialakulásában. Úgy tűnik, hogy a kémia volt az első természettudomány, amely hazánkban túllépett a megismerés és oktatás fokán, és rátért a kutatásra és publikálásra. Jacquin, Scopoli, Ruprecht, Müller Selmezbányán, Winterl és iskolája Pesten számos közleményt írt kutatási eredményeikről német és osztrák folyóiratokba, és jegyzett nevük lett a világban.

Mária Terézia vezette be a megyei „főfizikusi” (tishti főorvosi) állást, és ezek kötelességévé tette többek között a megye területén lévő ásvány- és gyógyvizek vizsgálatát. Ennek eredményeképpen sok, a vizek elemzésével foglalkozó könyv jelent meg. Ezek közül Österreicher Manes József *Analyses Aquarum Budensium praemissa methodo Prof Winterl* című könyvét, pontosabban könyvként publikált orvosi doktori disszertációját említem meg, mely 1781-ben jelent meg. Ebben a szerző a budai ásványvizek általa végzett analitikai vizsgálatainak eredményeit ismertette, melyeket Winterl professzor módszerével végzett, s benne az alkalmazott módszert is részletesen ismertette. Megállapíthatjuk, hogy Winterl jól ismerte a minőségi analízis akkor már használt számos reagensét, és ezeket újjal gazdagította, pl. a kénhidrogénnel, másrészt hogy módszere tulajdonképpen már sztöchiometrikus alapokon nyugodott, jóllehet sztöchiometria még nem is volt. Végül, hogy neki sikerült egyedül a világon vízben oldott flogisztont is meghatározni. Így a világon csak egyedül a budai gyógyvizek flogisztontartalma ismeretes. Megjegyzem még, hogy e könyv a BME könyvtárában található példányának lapjait én vágtam fel vagy 30 évvel ezelőtt, közel 200 éven át tehát olvasatlanul feküdt.

Fizikai tanszéke is volt az egyetemnek. A fizika mindenütt sokáig össze volt fonódva a filozófiával, s ettől nehezen is tudott elszakadni. Ez szerintem érthető is, hiszen a fizika az a tudomány, amelyik mindig a megismerés határán áll, előtte az ismeretlen, s az mindig a filozófia területe. Nem véletlen, hogy még a



legújabb kor nagy fizikusai, mint pl. Einstein vagy Heisenberg is gyakran váltottak át filozófiára. A fizika 17–18. századi felfedezései azonban nagyon látványosak, a tudósok szívesen mutatták be ezeket szalonokban a magas társaságnak, s az oktatás nálunk is e században fokozottabban a kísérleti fizika felé fordult. Ebben különösen Horváth János professzornak voltak érdemei.

Meglepő a csillagászat e századbeli hazai fejlődése és az iránta mutatott érdeklődés. Igaz, már Vitéz János csillagdat tervezett Nagyváradon. Magyarország azon országok sorába tartozott, amelyek a legkorábban vették át az 1582-ben XIII. Gergely által bevezetett, nevét viselő Gergely-naptárt. A magyar országgyűlés 1588-ban rendelte el kötelező használatát az országban. A 18. században számos spekulát alapítottak hazánkban, főként egyházi intézményekkel kapcsolatban. Debrecenben és Sárospatakon a református kollégiumok, Kolozsvárott és Nagyszombaton a jezsuiták rendeztek be ilyet. Gyulafehérvárott Batthyány püspök, Egerben Eszterházy Károly rendezett be csillagvizsgálót, a legkorszerűbb, Angliából hozatott műszerekkel. A nagyszombati egyetemen is építettek csillagászati obszervatóriumot. Az egyetem áthelyezése után Budán kezdte meg működését az új egyetemi csillagda. A legtöbb spekulá létrehozásában a Selmecbányán született Hell Miksának volt fontos szerepe.

Hell Miksa a kor világviszonylatban is egyik leghíresebb csillagásza volt. Adán király meghívására 1769-ben tudományos expedíciót vezetett a legészakibb Norvégiába a Vénusz Nap előtti átvonulásának megfigyelésére, amiből kiszámította a Nap–Föld távolságot. Mellékeredménye az expedíciónak, hogy kísérője és munkatársa, Sajnovics János ezen út során figyelt fel a magyar és lapp nyelv rokon vonásaira. Meg kell mondani, hogy ennek közlése itthon nem váltott ki lelkesedést. Ilyen primitív népek, mint a lapp meg a finn, lennének rokonaink, nekünk, a büszke, nemes, sok évszázados magyar nemzetnek! Ugyan kérem! Még vagy 100 évig tartott, míg ezt a nézetet úgy-ahogy elfogadtuk, de még ma sem egyhangúlag.

Hell Miksát akár tekinthetjük az első magyar tudósnak, aki külföldön érte el nagy felfedezéseit, hiszen a bécsi egyetemen volt 40 éven át professzor, és rögtön melléje sorolhatjuk Segner János pozsonyi orvost és fizikust, aki Németországban, Halléban dolgozta ki a  $\pi$  kiszámítására közelítő módszerét, és találta fel a Segner-kereket, a turbina őst.

Továbbhaladva az időben, a 19. század elején megfordult a Habsburg Birodalom politikai iránya. Megijedve a francia forradalom hatásától, a 18. századi reformkedvét merev konzervativizmus váltotta fel. S a magyar nemesség, mely korábban inkább ellenezte, mint támogatta a reformokat, most egyszerre a haladás kezdeményezőjévé vált. Megindult a nyelvújítás, megkezdődött a magyar reformkor. A magyar nyelvű tudomány is a reformkor igényei közé



tartozott. Igen ám, de kiderült, hogy a magyar nyelven ez nem olyan egyszerű. Hogy miért nem olyan egyszerű, azt megmagyarázza Nyulás Ferenc orvos, Winterl tanítványa 1800-ban Kolozsvárott megjelent *Erdélyországi orvosi vizeknek bontásáról közönségesen* című könyvében, amely az első magyar nyelvű kémiai tárgyú könyv. Ennek előszavában olvashatjuk:

„Elég bőv a magyar nyelv, így szól egy nagy nyelvművelő, nincs miért új szókorról gondoskodnunk. Elég bőv, az igaz, beszélni közönségesen, de nem tudományosan írni, mert ma akármi tudománynak nyúlunk írásához magyarul, hasonló fáradságunk egy sűrű erdőben utazáshoz, ahol mindenütt akkor kell magunk előtt az utat csinálni, amikor utazunk. Nekem többet kellett e munkámban a tárgyszóknak kitételivel, mint a vizeknek bontásával küszködnöm. Még senki magyarul vizet nem bontott, a kémia is újság nyelvünkben, innen szükségesképpen sok új szót kellett csinálnom...” Hasznos munkát végeztek e korai magyar nyelvművelők, megalkották a természettudomány magyar nyelvét. Nem is gondolnánk, mennyi szavunk ekkor született műszó, mint pl. összeadás, kivonás, osztás, egyenlet, folyadék, aránylat, buborék, hashajtó, eszköz, fertőzés, gőz stb., még soká lehetne folytatni. Aztán persze jöttek a túlzások. A kémiában derék nyelvmagyarítók, mint Schuster János meg Schirckhuber Móric pl. minden elem és vegyület nevét megmagyarosították, így lett a káliumból halvány, a nikkeltől ledérany, az arzénből férjeny (vajon mire gondolt Schuster, amikor ezt kitalálta), sőt csinált a rend kedvéért még a szép magyar rézből is rézanyt, a vasból meg vasanyt. S írták a tankönyvekben, „hogy amint már mondva volt, a cselsavas haméleg cselfőlsavavvá és cselfőléleg vizeggyé változik”.

Más tudományokban is folyt a nyelvújítás. Így például Jedlik Ányos az anion és kation helyett bemenenyt és kimenenyt ajánlott.

A reformkorban sok minden pozitív dolog történt és jött létre hazánkban. A természettudományok hazai fejlődése szempontjából azonban inkább passzív volt e kor. A nemzeti dolgok voltak a központban, a természettudományoknak pedig nem éppen nemzeti, sokkal inkább nemzetközi jellegük van; a tudósok inkább nyelvmagyarosítottak, semmint kutattak. De megalakultak olyan nemzeti intézmények, szervezetek, amelyek idővel előrevitték a tudomány ügyét is, mint 1825-ben a Magyar Tudományos Akadémia, 1841-ben a Magyar Orvosok és Természetvizsgálók vándorgyűlései indultak meg, 1841-ben létrejött a Magyar Természettudományi Társulat, 1844-ben a magyar Országgyűlés előírta a magyar nyelvű tanítást főiskolai intézményeinkben, 1846-ban a József Ipartanoda, 1848-ban meg az első specializált szakmai egyesület, a Magyarhoni Földtani Társulat alakult meg.

Két tudományos alkotásról azonban meg kell emlékeznem. Jedlik Ányos 1828-ban elkészítette az első elektromágneses kölcsönhatáson alapuló forgó-



készüléket, a villanymotor őst. 1832-ben pedig megjelent Bolyai János világraszóló *Appendix*e, amelyet senki nem vett észre és méltatott. Egy tudományos kuriozitás: 1847-ben a prágai egyetem fiatal kémikus tanársegéde, bizonyos Görgey Artúr felfedezte a kókusz-zsírsavat.

Ugyanez a korszak viszont igen sokat alkotott az ország technikai fejlesztésében, mint azt az alábbi táblázat mutatja:

1802:	megnyílt a Ferenc-csatorna a Duna–Tisza között
1816:	az első próba-gázvilágítás Pesten
1817:	az első gőzhajó a Dunán, Bernhard Antal <i>Carolinája</i>
1827:	az első lóvasút Pesten
1831:	megindult a Pest–Bécs közti menetrendszerű gőzhajójárat
1832:	megalakult a pesti Hídegylet
1833:	az első öntöttvas híd megnyitása Lugosnál Maderspach Károly tervei szerint
1833:	Vásárhelyi Pál megkezdte az Al-Duna-szabályozást
1837:	Irinyi János feltalálta a „zajtalanul gyúló” gyufát
1839:	megkezdte működését az első gőzmalom, a Pesti Hengermalom Rt.
1842:	az első iparkiallítás Pesten
1842–1849:	felépül a Lánchíd
1843:	megalakult a Schlick-féle vasöntöde
1845:	Ganz Ábrahám megalapította öntödéjét
1846:	vízre bocsátották a <i>Kisfaludyt</i> , az első balatoni gőzhajót
1846:	megindult a vasútközlekedés Pest–Vác között
1848:	az első távírvonal Bécs–Pozsony között

Az 1867-es kiegyezés pragmatikus történelmi fordulópont volt. Kompromisszum, de olyan, amelyik nagyon reális volt, és amelyik pezsgő fejlődést eredményezett. Gazdaságilag egységes, nemzetek feletti nagy piac volt a kettős monarchia. Bregenzről Brassóig és Lembergtről Ragusáig, azaz Lvovtól Dubrovnikig nem volt vám, nem volt határ, ugyanaz volt a pénznem, egy jó, konvertibilis pénznem, vagyis olyasmi valósult meg gazdaságilag itt, amit a mai Európai Unió szeretne elérni.

A belpolitikailag független magyar állam sorra hozta létre államiságának saját létesítményeit, köztük oktatási és tudományos intézményeit is, 1871-ben létrejött a második magyar egyetem Kolozsvárott, a világháború előtt, ill. alatt további kettő: Pozsonyban és Debrecenben, új épületeket kapott a pesti egyetem. Kétszer költözött új épületekbe a József Műegyetem, új, korszerű épüle-

tet kapott az ősi selmecbányai akadémia és sok más. Megalakultak az első, első-sorban a mezőgazdaság és mezőgazdasági iparok területén működő tudományos kutatóintézetek, ún. kísérleti állomások. 1912-ben már 27 volt belőlük, 300 kutatóval.

A kiegyezés kora kevéssel volt csak több negyven évnél, ezalatt épült 19 000 km vasútvonal, 11 Duna-híd. Megépült számos villanytelep, az első 1884-ben Temesvárott, Berlin mellett a legkorábbi Európában. Megérkezett a telefon, megépült az egyik legkorábbi telefonközpont (1881), kialakult a városokban a villamos vonalak hálózata, az első Budapesten a Teréz körúton 1887-ben, megépült Budapesten a föld alatti villamosvonal, az első a kontinensen (1896). (Csaknem nyolcvan évet kellett várni a másodikra.) Megépült a Vaskapu-csatorna, s ezzel lehetővé vált a hajózás végig a Dunán. Budapest világváros lett!

Az ipar fejlődését nehéz lenne felsorolni. Nagyon sokat fejlődött, kialakult a nagyipar, és több világjelentőségű találmány született.

A természettudományokban is felzárkóztunk. Korszerű laboratóriumokban, intézetekben dolgozó tudósaink több területen is bejegyezték nevüket tudományáguk történetébe. Kialakult az a magyar matematikai iskola Hunyadi Jenővel, König Gyulával, Kürschák Józseffel, Rados Gusztávval és Fejér Lipóttal élén, amely világrangot szerzett e téren hazánknak, s mely nagynevű utódokkal máig tartja e rangot.

A csillagászatban Konkoly-Thege Miklós és Gotthárd Jenő jutottak a saját maguk alapította és berendezett obszervatóriumaikban jeles és jegyzett eredményekhez. A fizikában elég magányosan, de annál magasabban állt Eötvös Loránd alakja. A kémia szintén felzárkózott a nemzetközi színvonalra. Ebben Than Károly iskolateremtő adottsága nyitotta meg az európai pályát, s uralta az egész korszakot e tárgyban tanítványainak iskolájával, hogy csak Lengyel Béla, Winkler Lajos, Buchböck Gusztáv, Ilosvay Lajos, Fabinyi Rudolf nevét említsem. A kémia közben szakokra vált a világon. Míg a fiatal műszeres analitika és a fizikai kémia már talált hazai művelőket, érdekes módon a régibb és jelentősebb szerves kémia szinte teljesen hiányzik e kor magyarországi kémiai palettájáról.

Történelmünk két jó évszázada után beléptünk a legrosszabba, a miénkbe, a huszadikba. Trianon után ugyan meglepő gyorsan magához tért az, ami megmaradt, így a tudomány is. Többnyire ugyanazok a tudósok maradtak a színen, akik már az előző korszakban szerepeltek. A kémiában Winkler, Buchböck, Bugarszky, Gróh. Ám legsikeresebb és legeredményesebb ekkor már nálunk is a szerves kémia lett. Az első szerves kémiai tanszék a Műegyetemen 1913-ban jött létre, s professzora, Zemplén Géza végig uralta a mezőnyt, s ért el nagy nemzetközi tekintélyt, s iskolája folytatta azt a következő periódusban. Új



területet nyitott Zechmeister László és Cholnoky László a kromatográfiával, Szent-Györgyi Albert pedig a biokémiában, melynek fontossága nőtt e korban, és teszi ezt ma is. A fizikai kémiának is a Műegyetemen alakult az első tanszéke 1922-ben, második professzora, Náray-Szabó István folytatott e területen oktatás mellett kutatást is. A kolloidika is megjelent hazánkban Buzágh Aladár személyében és sikeres könyveivel. Szebellédy László és Proszt János a műszeres analitika hazai úttörői, Szebellédy e tudományágat új módszerrel is gazdagította, a coulometriás analízissel. Schulek Elemér a gyógyszeranalitikát fejlesztette, minthogy a hazai gyógyszeripar egyik legeredményesebb iparágunkká lett. A szerves kémia is fellendült, Zemplén Géza mellett Bruckner Győző iskolájával.

Ebben a korban kezdődött meg a magyar kutatók elvándorlása külföldre, elsődlegesen politikai okokból, s folytatódott e század politikailag annyit változó további korszakainak mindegyikében, ugyancsak politikai okokból, s még tovább a jelenben is, gazdasági okokból. Sok-sok sikert értek el magyar alkotók a tudományok és technika területén hazánkon kívül, számos Nobel-díjat szereztek, hírnevet szülőföldjüknek. Panaszoljuk mostanában, hogy miért mennek, s ha mennek is, miért nem jönnek vissza? Azt hiszem, hogy ez túl van dramatizálva. Hiszen jönnek is vissza, s nemcsak, mint mondják, a tehetségtelenebbje. Van sok-sok tehetséges is köztük, aki itt akar élni, jóllehet tudja, hogy vannak a modern kutatásnak, a fizikának, a kémiának, a biológiának stb. olyan területei, amelyekben itthon soha többé nem versenyezhetünk a gazdag országokkal, mert sosem leszünk olyan gazdagok, hogy e kutatások óriási költségeit bíránk. Aki kinn marad, s eredményeivel hírnevet szerez, az végtére szülőföldje hírét is emeli!

Eljutottam a közelmúltig, a jelenig. Erről majd a jövő tudománytörténészének kell beszámolnia. Hiszen hogy mi lesz maradandó a mai tudományos eredményekből, azt a jelen legfeljebb sejtethi, de a jövő bizonyítja be. A millennium óta száz év telt el. Egy évszázad nagyon soknak tűnik, de ha úgy veszem, hogy annak kétharmadában már éltem, részt vettem benne, akkor nem is olyan sok!

Most még köszönetet illik mondani. Két embernek tartozom vele, az egyiknek nevére nem emlékszem. Vegyészhallgató volt vagy 30 éve, tanársegéd koromban a hallgatói laboratóriumban sétáltam, az egyik hallgatónál megálltam, digeráltatni készülvén őt. Ám ő megelőzött. „Tanár úr, ki találta fel a permanganometriát?” – kérdezte. Éppen avval titrált ugyanis. Meglepődtem. „Nem tudom – mondtam –, de megnézem a könyvtárban”, s otthagytam. Aztán kiderült, hogy nem olyan egyszerű a dolog, cikkről cikkekre mentem vissza, míg megtaláltam, hogy 1846-ban egy Margueritte nevű francia volt az

első, aki alkalmazta. Rájöttem közben, hogy a kémiai analitika történetét még senki sem írta meg. Bementem főnökömhöz, néhai Erdey László professzor úrhoz, hogy én ezt szeretném kutatni. Meglepődött. Gondolkozott. „Nem rossz ötlet, csinálja, de számoljon be róla időnként, hiszen ez érdekes lehet.” Jóindulatát, későbbi támogatását hálásan köszönöm neki holtában is.

Így lettem kémiatörténész, aztán tudománytörténész, ami akkor még nagyon szokatlan dolog volt Magyarországon, nem volt jegyezve a tudományok kategóriájában, nem szerepelt a korabeli Tudományos Minősítő Bizottság listáján. Bizony még tudományos fokozatot sem lehetett tudománytörténettel szerezni. Az MTA Kémiai Osztálya a többi természettudományi osztállyal ellentétben elfogadott kandidátusának, majd doktorának ilyen témákkal, s most még székfoglalót is tarthattam belőle. Köszönöm!

Köszönöm továbbá Orlai Györgynének, az Országos Műszaki Múzeum könyvtárosának segítségét munkámhoz.



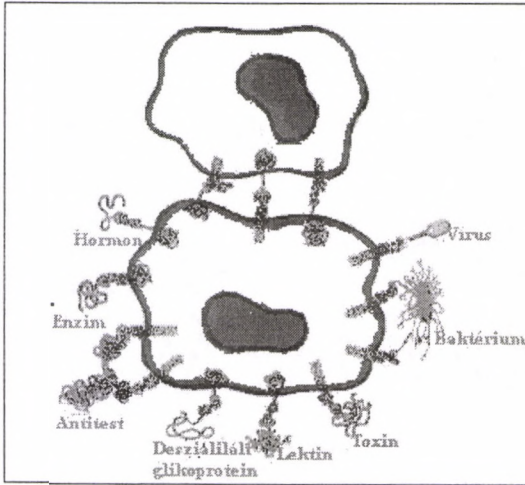
Lipták András  
az MTA rendes tagja

# FEHÉRJE-SZÉNHIDRÁT KÖLCSÖNHATÁSOK

Elhangzott 1998. szeptember 20-án

Az élővilág örökletes tulajdonságainak átadása, a sejtekben folyó anyagcsere-folyamatok történései, így pl. a DNS-DNS, DNS-RNS, RNS-fehérje és fehérje-szubsztrát (ligand) molekulák felismerési eseményei szinte kizárólagosan „másodlagos” kötések (hidrogénhidas, koordinatív, apoláros-apoláros, esetleg ionos) révén valósulnak meg. Kovalens kötések létrejötte szinte ismeretlen ezen folyamatokban. Egészen az 1970-es évek közepéig a szénhidrátoknak ezen folyamatokban legfeljebb szerkezeti szerepet (D-ribóz, 2-dezoxi-D-ribóz) tulajdonítottak, vagy mint az anyagcsere-folyamatok fontos szubsztrátjait (glükóz, glükogén, keményítő) tartották számon. Vázanyagként szereplő poliszacharidoknak (cellulóz, xilánok, kitinek) és a baktériumok exopoliszacharidjainak strukturális és védő feladatokat tulajdonítottak.

A jelentős szemléletváltozásra akkor került sor, amikor részben az emlős-sejtek, részben a baktériumok felszínén lévő molekulák szerkezetvizsgálatára is sor kerülhetett. E vizsgálatok során tisztázódott, hogy pl. az emberi vércsoportokat<sup>1</sup> a vörösvértestek felületén lévő glikolipidek és glikoproteinek szénhidrátkomponensei határozzák meg.<sup>2</sup> Ma általánosan elfogadott nézet, hogy a sejtek felületén lévő szénhidráttartalmú vegyületek (glikolipidek, glikoproteinek, lipopoliszacharidok), az ún. *glikokonjugátumok*, a sejt és a környezete közötti információcsere antennái, amelyek biztosítják a sejt-sejt, sejt-vírus, sejt-toxin, sejt-hormon, sejt-gyógyszer, sejt-baktérium és sejt-szubsztrát(ok) kapcsolatokat.<sup>3-5</sup>



1. ábra. A sejtek felületén lévő szénhidrátok kölcsönhatása a környezetünkben lévő anyagokkal

ható meg. E néhány szerkezeti sajátosság is kitüntetetté teszi a szénhidrátokat a bifunkciós aminosavakkal vagy nukleotidokkal szemben.<sup>6</sup>

1. táblázat. Lehetséges izomerek száma peptidek és oligoszacharidok esetében

Megnevezés	Összetétel	Peptid	Oligoszacharid
Monomer	Z	1	1
Dimer	Z <sub>2</sub>	1	11
Trimer	Z <sub>3</sub>	1	120
Tetramer	Z <sub>4</sub>	1	1424
Pentamer	Z <sub>5</sub>	1	17 872
Monomer	Z	1	1
Dimer	YZ	2	20
Trimer	XYZ	6	720
Tetramer	WXYZ	24	34 560
Pentamer	VWXYZ	120	2 144 640

Ezek mellett további szerkezeti változatosságra ad lehetőséget az a kísérleti tény is, hogy szemben a négy nukleotiddal, a húsz aminosavval, a természetes szénhidrát oligo- és polimerek felépítésében rendkívül nagyszámú, eltérő szerkezetű monoszacharid építőelem vehet részt, s ezek esetenként mindkét enantiomer (D és L) formában részt is vesznek.



Az elválasztástechnikai módszerek finomodása, a műszeres vizsgálati módszerek nanomólos mennyiségek izolálására és szerkezetmeghatározására adnak lehetőséget. Biológiai vizsgálatokhoz azonban ezek az anyagmennyiségek nem elegendők. Jóllehet az élő természet leleményessége, a szintetikus kémikust naponta megszégyenítő egyszerűsége és eleganciája könnyűszerrel produkálja a vegyületeket, jelenleg a tényleges forrást legalább mg-os szinten csak a szintetikus preparatív kémia biztosítja. E vegyületek metabolizmusát rendkívül specifikus, legtöbbször sejtorganellumok membránjaihoz kötött glikoziltranszferázok, ill. hidrolázok valósítják meg. Ezek közül ma még csak néhánynak ismerjük a szerkezetét, s a transzferázok nukleozid-cukor szubsztrátokkal működnek, amelyek szintézise vagy bioszintézise ugyancsak részben tekinthető megoldottnak.

A széhidrátkémia jóllehet ma már igen gazdag eszköztárral rendelkezik, általánosan alkalmazható módszerek azonban csak részben állnak rendelkezésünkre, így minden egyes oligoszacharid szintézisét unikális feladatnak tekinthetjük, ahol a kémikus kreativitására, manualitására és nem utolsósorban szerencséjére is szükség van.

A székfoglaló anyaga a biológiai motiváció alapján négy részre tagolható:

- az  $\alpha$ -amiláz kromogén szubsztrátjainak előállítására ciklodextrin alapon, a szubsztrát felismerés, a kötőhely és a katalitikushely feltérképezése,
- adhéziós proteinek ligandjai, szialil-LewisX analógok szintézise,
- „oligoszacharinok” szintézise, új védőcsoport-stratégia kialakítása,
- mesterséges antigének előállítása oltóanyag-termeléshez, ill. diagnosztikai célra.

A felsorolt, biológiai szempontból eltérő hatású anyagoknál az oligoszacharid szerkezet közös, bár meglehetősen eltérő szintetikus módszerek kidolgozása vált szükségessé. Nehezen válaszolható meg azonban az a kérdés, hogy a biológiai szerep vagy a kémiai szintézis kihívásai domináltak-e az egyes témák kiválasztásánál. Nagyon reméljük, hogy biológiai fontosság mellé sikerült szellemes, kémiaiailag is új megoldásokat felsorakoztatni.

## Az $\alpha$ -amiláz kromogén szubsztrátjainak előállítása ciklodextrin alapon

Az  $\alpha$ -amiláz endo- $\alpha$ -(1 $\rightarrow$ 4)-glükózil-hidroláz, amely az exogén eredetű keményítőt és glükogént maltodextrinné bontja le. A humán  $\alpha$ -amiláznak két, a nyál- és a hasnyálmirigy által termelt formája ismert. Az utóbbi a fontosabb. Testfolyadékokban előforduló koncentrációja a hasnyálmirigy működésére vonatkozóan diagnosztikai jelentőségű.<sup>7</sup> A klinikai gyakorlatban évenként



közel 100 millió  $\alpha$ -amiláz-meghatározást végeznek, a reprodukálhatóság és a megbízhatóság érdekében a maltoheptaóz kromofór glikozidjait használják szubsztrátként, és segédenzimekkel történő kezelés után a minta 4-nitrofenol ill. 2-klór-4-nitrofenol tartalmát spektrofotometriásan mérik.<sup>8,9</sup>

A glikozilhidrolázok hatásmechanizmusának tanulmányozásánál három kérdésre kell feleletet adni: a szubsztrát felismerése, kötődése az aktív helyen és a glikozidos kötés hasadása. Az  $\alpha$ -amilázzal kapcsolatos vizsgálatoknál alkalmas szubsztrátok megválasztásával a fenti kérdésekre adekvát válaszokat adhattunk. Ahogyan az a bevezetőben említésre került, a klinikai gyakorlatban ma szinte kizárólagosan 4-nitrofenil  $\alpha$ - vagy  $\beta$ -maltoheptaózidot használnak. Ezek előállítására enzimikus transzferszintézisekkel történik, rendkívül alacsony hozammal, igen fáradságos tisztítással nyerik a kívánt vegyületeket, s az ár rendkívül magas. Ezen szubsztrátok nyeréséhez a mi munkahipotézisünk abból a tényből indult ki, hogy a természet olcsón kínálja a keményítőből ipari méretekben nyerhető  $\alpha$ -,  $\beta$ - és  $\gamma$ -ciklodextrineket, amelyek 6, 7, ill. 8  $\alpha$ -(1 $\rightarrow$ 4) kötésű glükózegységből felépülő ciklikus molekulák, s hidrolízisüknek elvileg maltohexaózt, heptaózt ill. oktaózt kellene eredményezni. Másoknak is eszükbe jutott ez a lehetőség, de valamennyi kémiai vagy biokémiai próbálkozás alacsonyabb tagszámú keverékhez vezetett. A magyarázatot kinetikai mérések szolgáltatták, amelyekből kiderült, hogy az egész folyamat leglassúbb s így sebesség-meghatározó lépése, a makrociklus felnyílása, azaz a lineáris dextrinek sokkal gyorsabban hidrolizálnak, mint a ciklodextrinek.

Különböző ciklodextrin-származékok szintézise során megfigyeltük, hogy ezek savakkal szemben általában érzékenyebbek mint a szubsztituátlan párjaik, és ez a savlabilitás általában a szubsztituensek térkitöltésének növekedésével fokozódik, azaz a molekula zsúfoltságával a glikozidos kötés reaktivitása növekszik. Ezt a megfigyelést gyümölcsöztettük a peracetilezett ciklodextrinek acetolízise során, amikor is kiváló hozammal, egyszerű kristályosítással nyertük a peracetilezett  $\alpha$ -CD-ből (1) a teljesen acetilezett maltohexaózt (7), míg a  $\beta$ -CD-ből (2) a maltoheptaózt (8) és a  $\gamma$ -izomerből (3) a maltooktaóz acetátot (9). Sikertült a reakciókat úgy irányítani, hogy a szabad ciklodextrineket különböző Lewis-sav típusú katalizátorok jelenlétében szobahőmérsékleten acetileztük, majd a reakcióelegy hőmérsékletének emelésével acetolizáltuk a makrociklust.<sup>10</sup>

A  $\beta$ -CD magasabb hőmérsékleten és hosszabb reakcióidővel kromatográfiásan jól elválasztható peracetilezett glükóz $\rightarrow$ maltoheptaóz keveréket adott, így rendelkezésünkre állt a teljes maltooligomer sorozat ( $G_3 \rightarrow G_8$ ) (4–9), amelyeket konvencionális módszerrel acetobróm származékokká (10–15) alakítottuk, ezeket 4-nitrofenollal, ill. 2-klór-4-nitrofenollal Königs–Knorr típusú reakcióban  $\beta$ -glikozidok peracetátjaivá (16–21 és 22–27), majd Zemplén szerinti elszappano-



sítással kromofor aglikont tartalmazó  $\beta$ -glikozidokká (28–33 és 34–39) alakítottuk. A 4-nitrofenil-glikozidokból (28–33) a nem redukáló végen ugyancsak kromofort hordozó 4,6-O-benzilidén származékokat (40–45) preparáltunk, így ezek esetében „kettős” kromofor jelölést sikerült elérnünk.

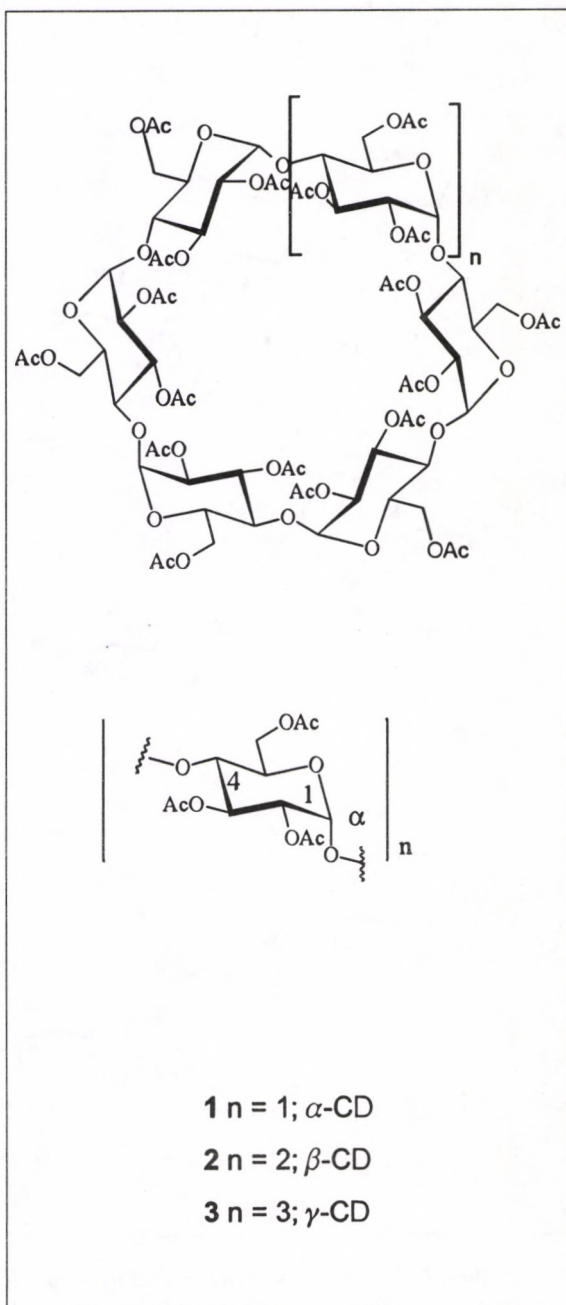
A 3. ábrán látható vegyületeket (28–45) szubsztrátokként használva, a reakciókinetikai paraméterek ( $K_M$ ,  $V_{max}$ ) és hasítási termékek analízise alapján a következő megállapításra jutottunk:<sup>11</sup>

- az enzim felületén feltehetően egy minimálisan öt kötőhelyet tartalmazó mélyedés valószínűsíthető,

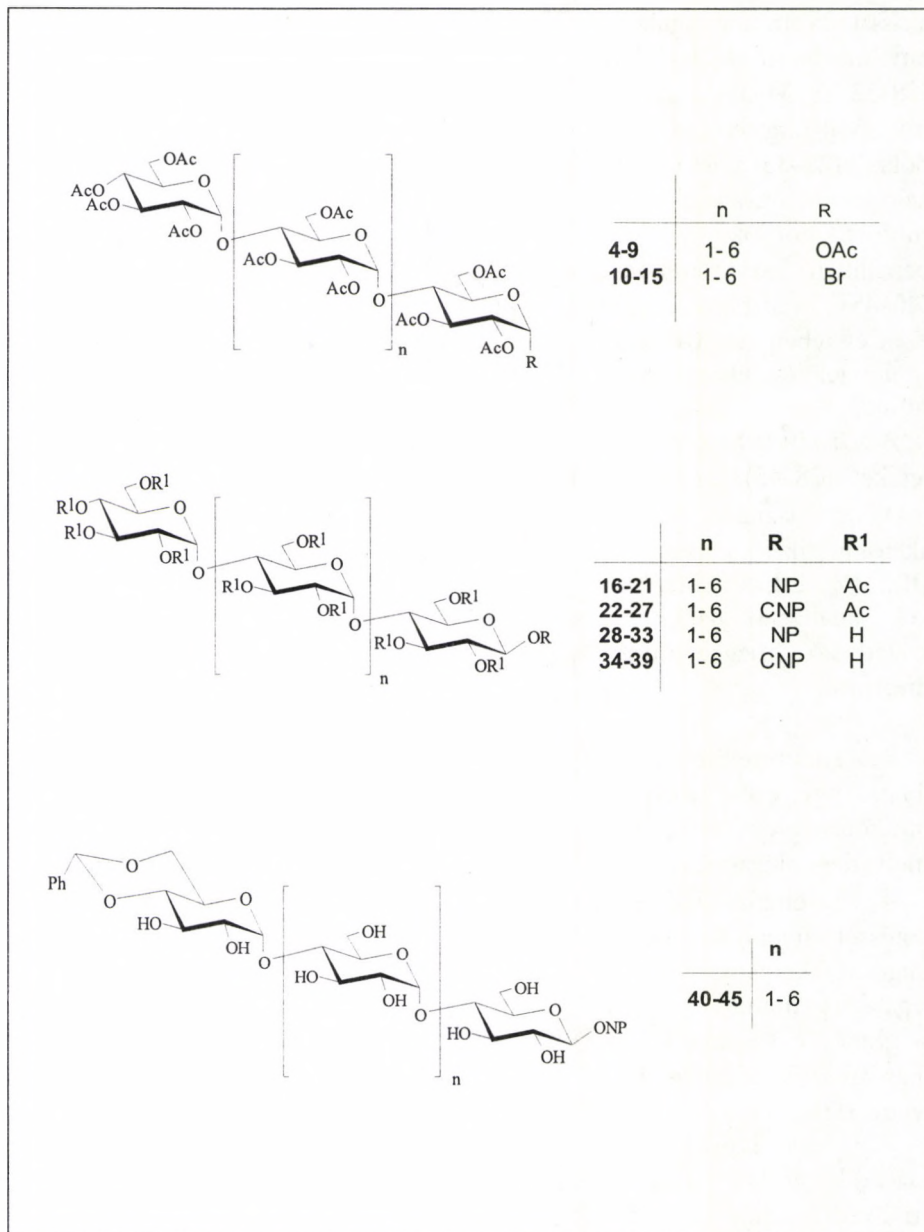
- az enzim  $\alpha$ -(1 $\rightarrow$ 4) kötéssel felépülő glükóz oligomereket ismer fel, s ez legalább pentamer legyen, s a glükóz-egységeket aromás gyűrűk részben helyettesíthetik,

- a katalitikus hely a második és a harmadik „mélyedés” között található.

A bontási képet és a hasítási frekvenciákat a 4. ábra szemlélteti.



2. ábra. Peracetylezett ciklodextrinek szerkezete



3. ábra. Ciklodextrinek acetolízisével nyert acetilezett maltooligomerek (4–9), acetobróm maltooligomerek (10–15), acetilezett glikozidok (16–27), glikozidok (28–39) és kettős kromofort tartalmazó glikozidok (40–45) szerkezete



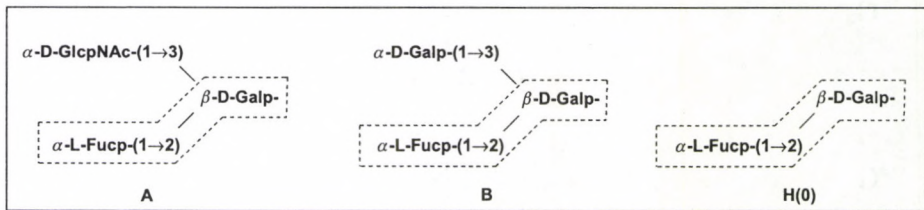
**Maltooligomer-származékok illeszkedése  
az  $\alpha$ -amiláz aktív centrumához**

		<u>-3</u>	<u>-2</u>	<u>-1</u>	<u>+1</u>	<u>+2</u>		%
<b>G<sub>4</sub></b>		Bnl—G—G—	G—G—	G—G—	NP			95
		Bnl—G—G—G—	G—G—	G—G—	NP			5
			G—G—G—	G—G—	NP			64
			G—G—G—	G—G—	NP			36
<b>G<sub>5</sub></b>		Bnl—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	NP			37
		Bnl—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	NP			28
		Bnl—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	NP			35
			G—G—G—G—G—	G—G—	NP			100
<b>G<sub>6</sub></b>		Bnl—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	NP			100
		G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	NP			54
			G—G—G—G—G—G—	G—G—	NP			46
<b>G<sub>7</sub></b>		Bnl—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	G—G—	NP		80
		Bnl—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	G—G—	NP		20
		G—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	G—G—	NP		41
		G—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	G—G—	NP		33
			G—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	NP		26
<b>G<sub>8</sub></b>		Bnl—G—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	G—G—	NP		73
		Bnl—G—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	G—G—	NP		9
		Bnl—G—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	G—G—	NP		18
		G—G—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	G—G—	NP		28
		G—G—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	G—G—	NP		37
		G—G—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	G—G—	NP		24
			G—G—G—G—G—G—G—G—	G—G—	G—G—	NP		11
		<u>-3</u>	<u>-2</u>	<u>-1</u>	<u>+1</u>	<u>+2</u>		

4. ábra. Az  $\alpha$ -amiláz öt mélyedést tartalmazó kötőhelyéhez a szubsztrátok illeszkedése és a -1; +1 katalitikus helyen a glikozidos kötések hasadásának gyakorisága

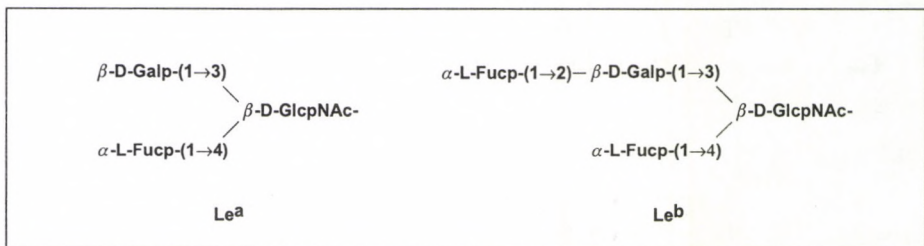
## Adhéziós proteinek ligandjai, szialil-LewisX analógok szintézise

A vércsoportok létezését még a század elején Landsteiner<sup>1</sup> ismerte fel, de csak az 1970-es években vált elfogadottá, hogy a csoportspecifitást a vörösvérsejtek felületén lévő oligoszacharidok határozzák meg. A leggyakrabban előforduló ABO-rendszerben ezek az oligoszacharidok a következő szerkezettel írhatók le:



5. ábra. Az ABH(O) vércsoportokhoz tartozó vörösvértestek felületi antigénjeinek szerkezete

A lényegesen alacsonyabb gyakorisággal előforduló Le<sup>a</sup> ill. Le<sup>b</sup> vércsoportok komponensei azonosak, csak a kötéstípusban és az anomerkonfigurációban különböznek egymástól és az ABO-rendszertől.

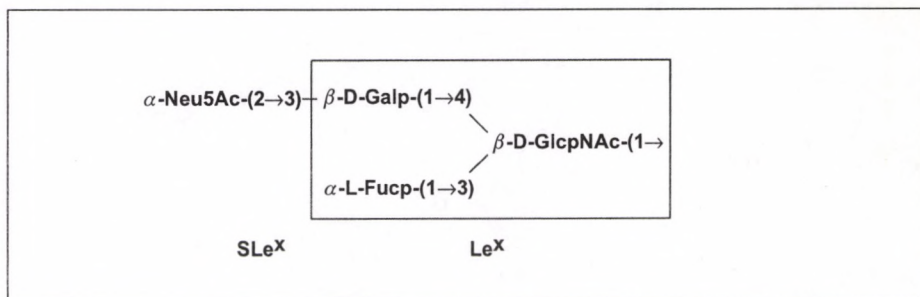


6. ábra. A Lewis<sup>a</sup> és Lewis<sup>b</sup> vércsoportokhoz tartozó vörösvértestek felületi antigénjeinek szerkezete

A vércsoportanyagoknak a vérátömlesztésnél van rendkívüli szerepük. A fehérvérsejtek és a vérlemezkék felületén néhány évvel ezelőtt egy új tetraszacharidot figyeltek meg, amely egy igen ritka vércsoport triszacharid, a LewisX (Le<sup>x</sup>)<sup>12,13</sup> szialsavval glikozilezett formája, így szialil-LewisX-nek<sup>14-17</sup> nevezték el, s szerkezete a 7. ábrán látható.

A bekeretezett triszacharid a Le<sup>x</sup>, s ez a szerkezet a Le<sup>a</sup>-tól csak a D-galaktoz és az L-fukóz kötéstípus felcserélődésében különbözik.

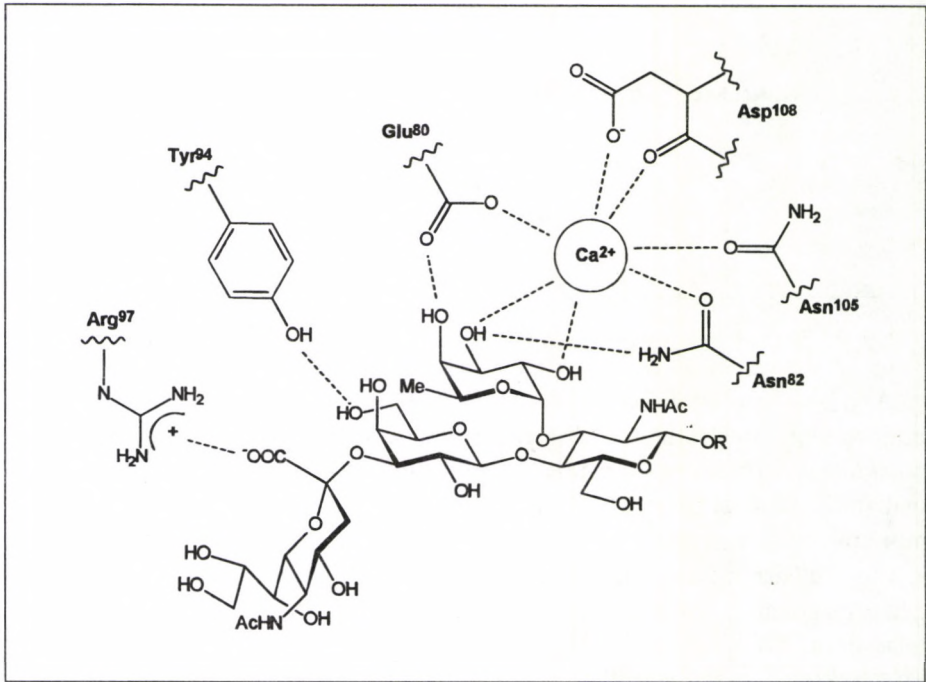




7. ábra. A LewisX és a szialil-LewisX tri-, ill. tetraszacharid szerkezete

A szialil-LewisX felismert biológiai szerepe, nevezetesen, hogy az érfal endotel sejtjeinek felületén elhelyezkedő adhéziós proteinek egyik tagjának, a *szelektinnek* természetes ligandja, szinte új fejezetet nyitott meg a glikobiológiában. Korábról is ismert jelenség, hogy mechanikai sérülés esetén, testidegen anyagoknak szövetekbe kerülésénél, a sérült szövetrészben a leukociták kijutnak az érrendszerből, és egy gyulladásos folyamatban eltávolítják a testidegen anyagokat. A folyamat első szakaszában a leukociták mozgása az erekben lelassul, az érfalhoz közeledve azon gördülnek, majd kijutnak a szomszédos szövetekbe.<sup>4,18-20</sup> Ez normál jelenség, az immunvédekezési mechanizmus folyamata. Számos esetben, így citokinek, endotoxinok jelenlétében, vagy autoimmun kórképekben hasonló, nemkívánatos gyulladásos folyamatok játszódhatnak le. A legfontosabb megfigyelés azonban az volt, hogy a malignus, transzformált sejtek felületén is megjelennek SLe<sup>x</sup> molekulák, a keringésből a környező szövetekbe az előbbieken leírt módon kijutnak, és áttételeket, azaz metasztázist eredményeznek. Ezek a felismerések különösen a gyógyszergyárak részéről igen élénk kutatási tevékenységet váltottak ki, a szialil-LewisX analógok ezrei, talán tízezrei kerültek előállításra, ill. biológiai vizsgálatra. E vizsgálatok célja olyan ligand keresése, amely a keringésbe bejuttatható, specifikus aktivitása révén az endotel sejtek felületén lévő szelektinek kötőhelyeit lefedi és megakadályozza alkalmasint a leukociták, ill. a transzformált sejtek kötődését és a keringésből történő kijutását.

A szintetikus vizsgálatok mellett fény derült arra is, hogy a SLe<sup>x</sup> szelektinek-hez történő kötődéshez nem szükséges a teljes tetraszacharid, elegendő az  $\alpha$ -L-fukóz három hidroxilcsoportja, a  $\beta$ -D-galaktopiranozil rész OH-4,6 hidroxiljai, továbbá egy, a Galp-egység 3-as pozícióján egy negatív töltést hordozó csoport ( $\text{COO}^-$ ,  $\text{O-SO}_3^-$ ). A  $\beta$ -D-GlcpNAc rész csak a hídmolekula szerepét tölti be, a neuraminsavat pedig egy  $\text{CH}_2\text{-COO}^-$ , vagy egy  $3\text{-O-SO}_3^-$  csoport is helyettesítheti. Időközben az is kiderült, hogy a Le<sup>x</sup>  $3\text{-OSO}_3\text{H}$ -ja



8. ábra. A  $SLe^x$  kalcium közvetített kötődése az L-szelektinhez

természetes ligandja az L-szelektinnek. Az L-szelektinen a  $SLe^x$  kötődését a 8. ábra szemlélteti.

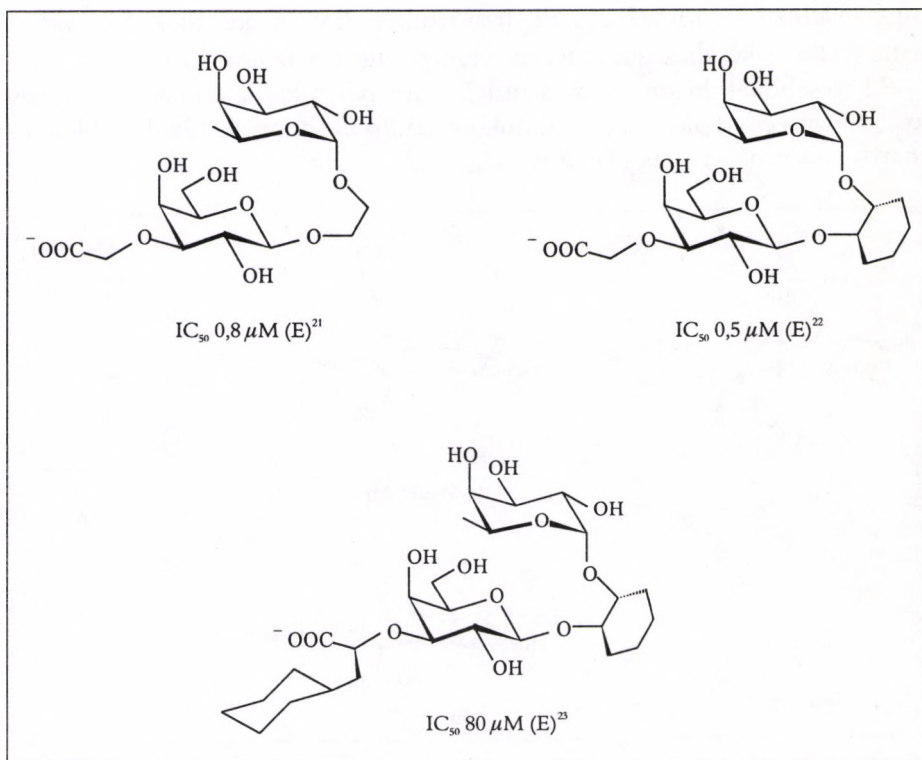
Az eddig szintetizált szelektin analógok közül a legaktívabbaknak a 9. ábrán látható vegyületek bizonyultak.

A természetes ligandok és általában a szintetikus analógok rendelkeznek néhány olyan szerkezeti vonással, amelyek gyógyszer formában történő felhasználásukat nehezítik. Így pl. a természetes oligoszacharidok a testfolyadékokban lévő glikozilhidrolázok hatására relative könnyen hidrolizálnak, a szulfátészterek pedig az észterázok hatására ugyancsak bomlanak.

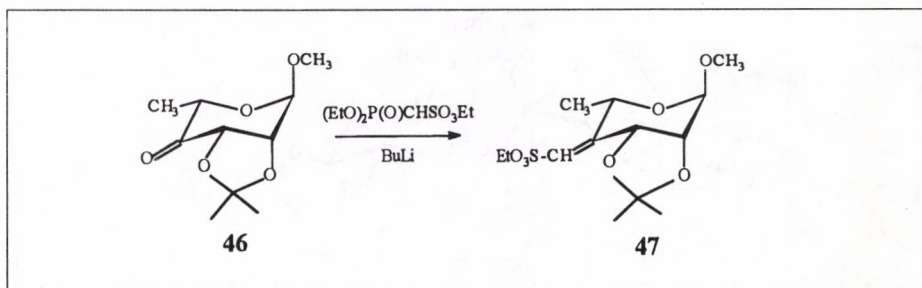
Mi az utóbbi oldalról közelítettük a természetes ligandumok érzékenységét, amikor is cukoralkilszulfonát típusú vegyületek szintézisét valósítottuk meg. Cukorszulfonsavak természeti előfordulásáról egyetlen adatunk van, valamennyi fotoszintetizáló növény kloroplasztmembránjában egy 6-dezoxi-6-szulfo-D-glukóz glikolipid formájában fordul elő, amelynek bioszintézise is ismert. Ez a természetben előforduló legerősebb savak közé tartozik.

Előállításukat két úton kíséreltük meg, egyrészt Wadsworth–Horner–Emmons<sup>25</sup>-reakcióban (10. ábra).





9. ábra: Szintetikus szelektin ligand analógok ( $\text{IC}_{50}$  = 50%-os telítési koncentráció)

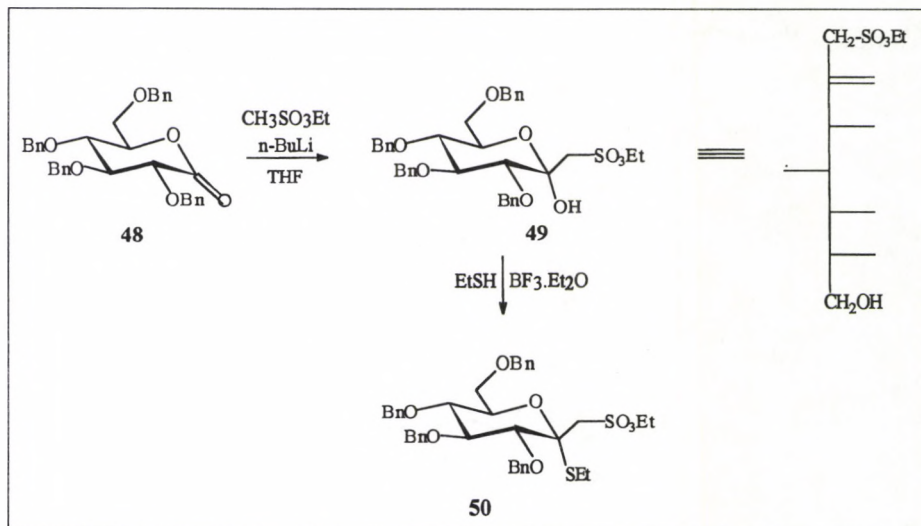


10. ábra. Ulozid reakciója Wadsworth–Horner–Emmons-reagenssel

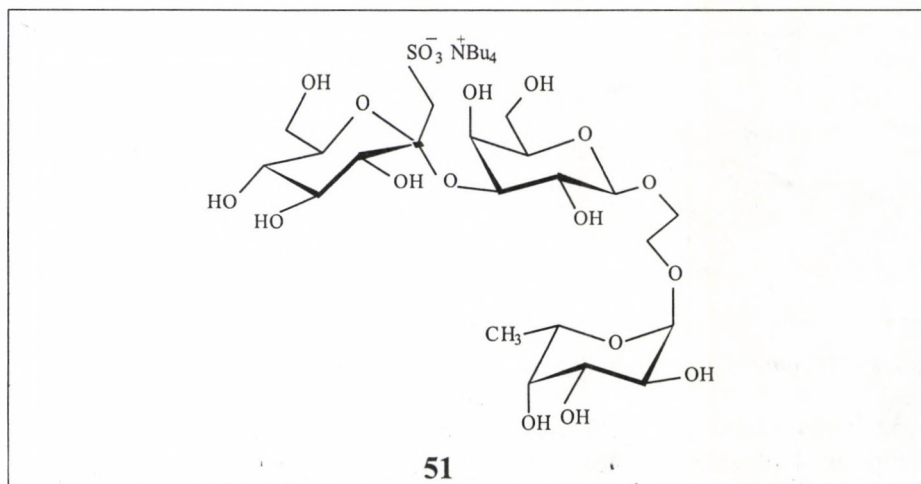
Az L-ramnózból nyerhető metil 6-dezoxi-2,3-O-izopropiliden- $\alpha$ -L-lyxo-hexopirán-4-ulozidból<sup>24</sup> (**46**) egyetlen etilénszármazékot nyertünk (**47**), hidrogenolízise azonban két diasztereomer származékhoz vezetett, amelyeket nem sikerült elválasztanunk. A benzil 2,6-di-O-benzil- $\beta$ -D-arabino-hexo-

piran-3-ulozidból mindkét geometriai izomer (**E** és **Z**) keletkezett és hidrogenolízisük is két diasztereomerhez vezetett. Így ezt az utat feladtuk.

Sikeresebbnek bizonyult az a reakció, amelyben karbanion addíció révén különböző védett aldonsav-laktonokból szulfouloosonsavakat izoláltunk anomertiszta formában. Pl.: (11. ábra).



11. ábra. Aldonsav-laktonok reakciója metánszulfonsav-etilészterrel



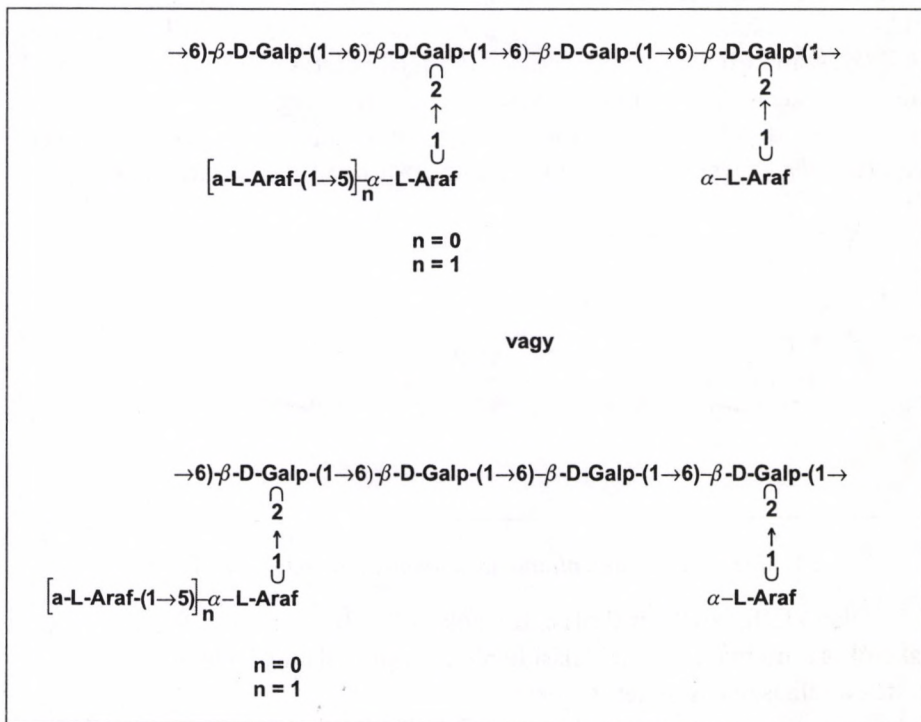
12. ábra. Új típusú szelektin ligand szerkezete



A félcetál (49) igen jó hozammal etil tio-glikoziddá (50) alakítható, amely tiofil reagenssel (NIS-TfOH) glikozilezésre használható. A részletek mellőzésével csak az ún. pszeudo-tetraszacharid (51) szerkezetét adjuk meg (12. ábra).

## Oligoszacharinok szintézise

Ha a növényi sejteket vírus- vagy baktériumtámadás vagy akár a sejteket mechanikai sérülés éri, úgy a növény fitoalexinek termelésével egy kvázi immunvédekezési mechanizmust indít el. A vizsgálatok azt mutatják, hogy a fitoalexinek nem proteinek, tehát nem elsődleges géntermékek, de szintézisük természetesen olyan nyugvó, represszált gének működésbe lépésével történik, amelyek révén a fitoalexinek szintéziséhez szükséges enzimek egész sora szintetizálódik. Közel másfél évtizedes vizsgálat sorozat valószínűsíti, hogy a növényeket érő támadás során néhány sejt mintegy „feláldozza” magát, és sejtfalából hidrolitikus enzimek közreműködésével 7–9 monoszacharidból álló oligoszacharidokat szabadít fel, amely oligoszacharidok rendkívül alacsony

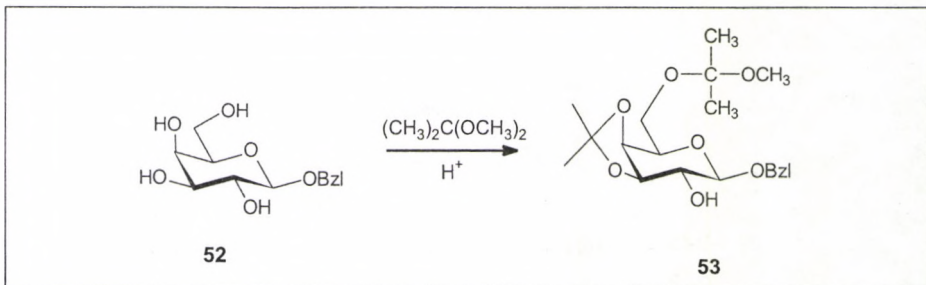


13. ábra. Arabinogalaktánok ismétlődő oligoszacharid-egységei

koncentráció mellett aktiválják a nyugvó, a fitoalexinek szintézisében részt vevő enzimek génjeit, s beindul egy kaszkádrrendszerű védekezési folyamat. Ezeket a sejtfallebontási termékeket összefoglaló néven *oligoszacharinoknak*<sup>26</sup> nevezik, de a szakirodalom *fitoalexin-elicitor*-okként is említi. Tekintve, hogy ezek az anyagok a növényvédelem szempontjából rendkívül fontosak lehetnek, több kiváló laboratórium foglalkozik az oligoszacharinok szintézisével és vizsgálatával.

Mi e vegyülettípus szintézisével közvetve kerültünk kapcsolatba. A Münchener Egyetemen Wagner professzor csoportja az *Echinacea purpurea* poliszacharidjai között az immunrendszert stimuláló makromolekulá(ka)t talált. E felfedezés ipari hasznosítása is megtörtént, sejtenyészetből nyerik az aktív anyagot. 1996-ban a poliszacharid-keverékből egy különösen aktív komponenst izoláltak, amely *arabinogalaktánnak* bizonyult, s vizsgálataik a 13. ábra szerinti szerkezetet valószínűsítették.

Megkeresés érkezett csoportunkhoz, hogy gyűjteményünkben van-e ilyen típusú oligoszacharid, amely(ek) alkalmasak lennének monoklonális antitestek termeltetésére, amelyek a későbbiek során analitikai reagensként szolgálhatnának. Korábban ilyen vegyületek szintézisével nem foglalkoztunk, így 1997 tavaszán kezdtük el a feladattal való foglalkozást, s egy korábban általunk felismert reakciónak az adaptálásával. Megfigyeltük, hogy pl. a benzil  $\beta$ -D-galaktopiranozid (52) dimetoxipropánnal egy sav katalizálta reakcióban a következő (14. ábra), egyetlen szabad OH csoportot tartalmazó származékot (53) adja.<sup>27</sup>

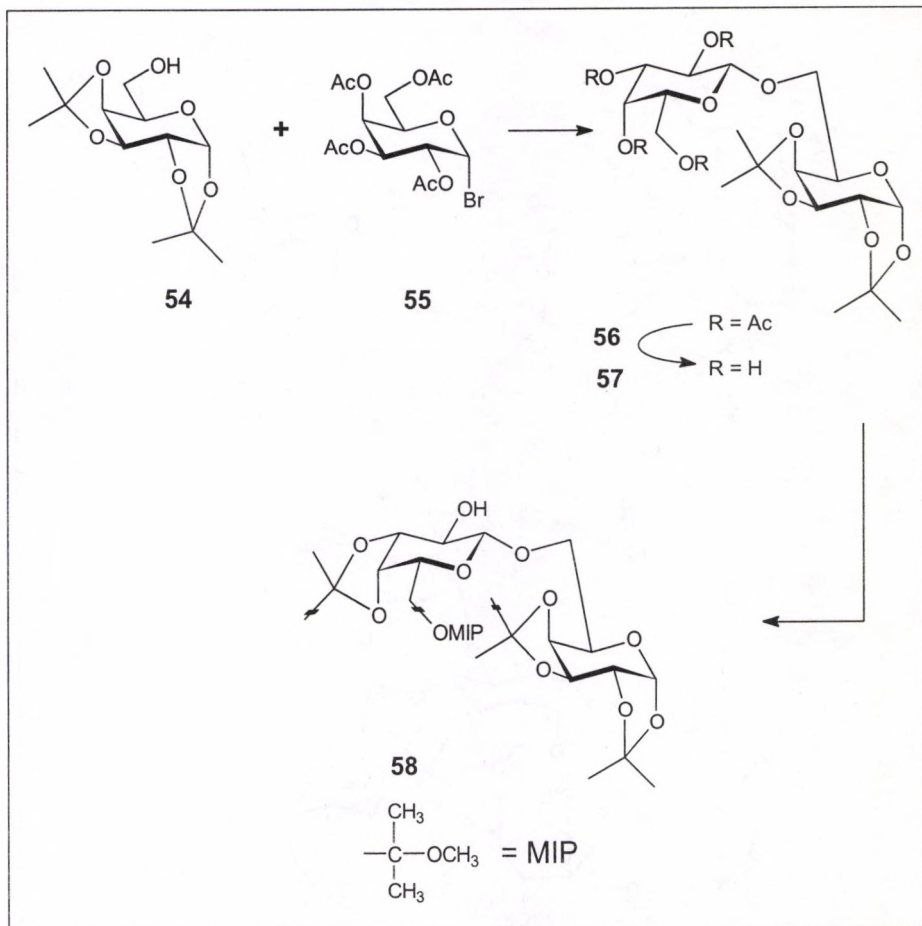


14. ábra.  $\beta$ -D-galaktopiranozidok reakciója dimetoxipropánnal

A reakció felhasználásával olasz szerzők<sup>28</sup> később részletesen foglalkoztak, s reakciókörülmények és az izolálási feltételek optimalizálásával jelentősen kiszélesítették a felhasználási lehetőségeket.

Az egyetlen lépésben nyerhető 1,2:3,4-di-O-izopropilidén- $\alpha$ -D-galaktopiranozt (54) kiváló hozammal glikozileztük  $\beta$ -(1 $\rightarrow$ 6)-kötésű diszachariddá



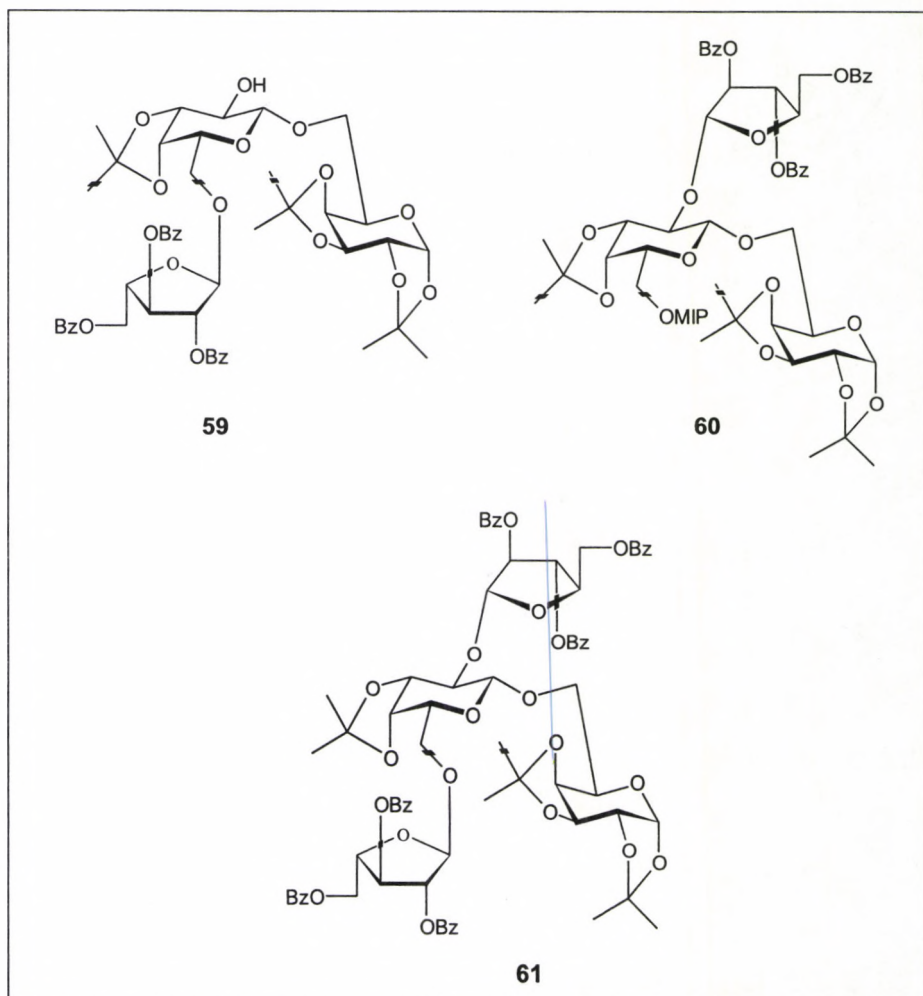


15. ábra. 2'-OH tartalmú  $\beta$ -(1 $\rightarrow$ 6)-digalaktóz-származék egyszerű előállítása

(56), amelyet Zemplén szerint elszappanosítva nyertük a (57)-et, amelynek dimetoxipropános kezelésével izoláltuk azt a diszacharid-származékot (58), amely az OH-2' csoportot tartalmazta (15. ábra).

A dimetilmetoximetil (MIP)-csoport savérzékenységét ismertük, mégis meglepetésnek tűnt az az észlelet, hogy az 58 arabinózilezése brómcukorral három terméket adott. Ezek kromatográfiás elválasztása után a vegyületek szerkezete a 16. ábra szerint adódott.

A három termék közül a 60 a célvegyület, a másik kettő (59 és 61) keletkezését a MIP hidrolízisével értelmezhetjük a reakció során a promotorból keletkező Lewis-sav-karakterű vegyületek révén. Az 59–61 vegyületekből a ben-



16. ábra. Az 58-as vegyület 2,3,5-tri-O-benzoil- $\alpha$ -L-arabinofurazonil-bromiddal történő glikozilezése során keletkező vegyületek szerkezete

zoil-csoportokat elszappanosítással, az izopropilidén-csoportokat pedig savas hidrolízissel távolítottuk el és nyertük a két tri- és a tetraszacharidot.

A MIP-et kémlelendő, igyekeztünk közel bázikus reakciófeltételeket előállítani porított molekulaszita és trimetilpiridin alkalmazásával,  $\text{Hg}(\text{CN})_2$ -ot használva promotorként. A reakció során két termék képződését detektáltuk, az egyik a 60-as célvegyület, míg a másik (62) a képződött MIP-tartalmú triszacharid dimerizációjával jött létre (17. ábra).



A vegyület szimmetrikus szerkezettel rendelkezik, ez egyértelműen adódott a  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumból, a  $^1\text{H}$ -NMR spektrum integrált protonszáma bizonyította az  $-\text{O}-\text{C}(\text{CH}_3)_2-\text{O}-$  szerkezeti egység jelenlétét. A MALDI-TOF-MS a molekulatömeg révén megerősítette a feltételezett struktúrát.

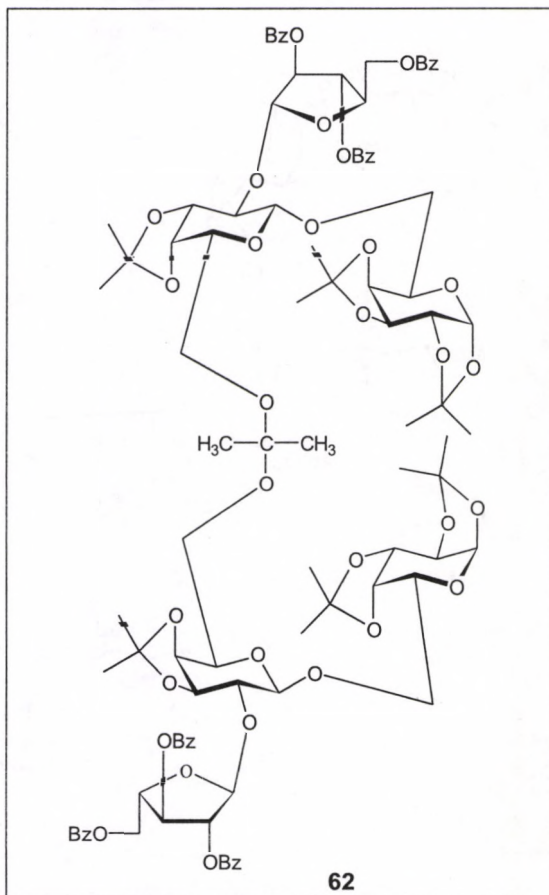
A két vegyület elszappanosítását követő enyhe savas hidrolízis ugyanazt a triszaszcharidot szolgáltatva, jelezve, hogy a dimetilmetilén acetálhíd híg savakkal hidrolizálható az interglikozidos kötések sérülése nélkül.

A mono-MIP digalaktozid-származék (58) kiváló hozammal benzilezhető (63), s a MIP savas hidrolízisével nyert 6'-OH vegyület az ugyancsak 63-ból nyerhető diszaszcharid donorral (65) a 66-os tetraszaszcharid nyerhető. Ez utóbbi vegyületből a benzil-csoportok eltávolításával egy két arabinozil-egységet tartalmazó hexaszascharid szintetizálható.

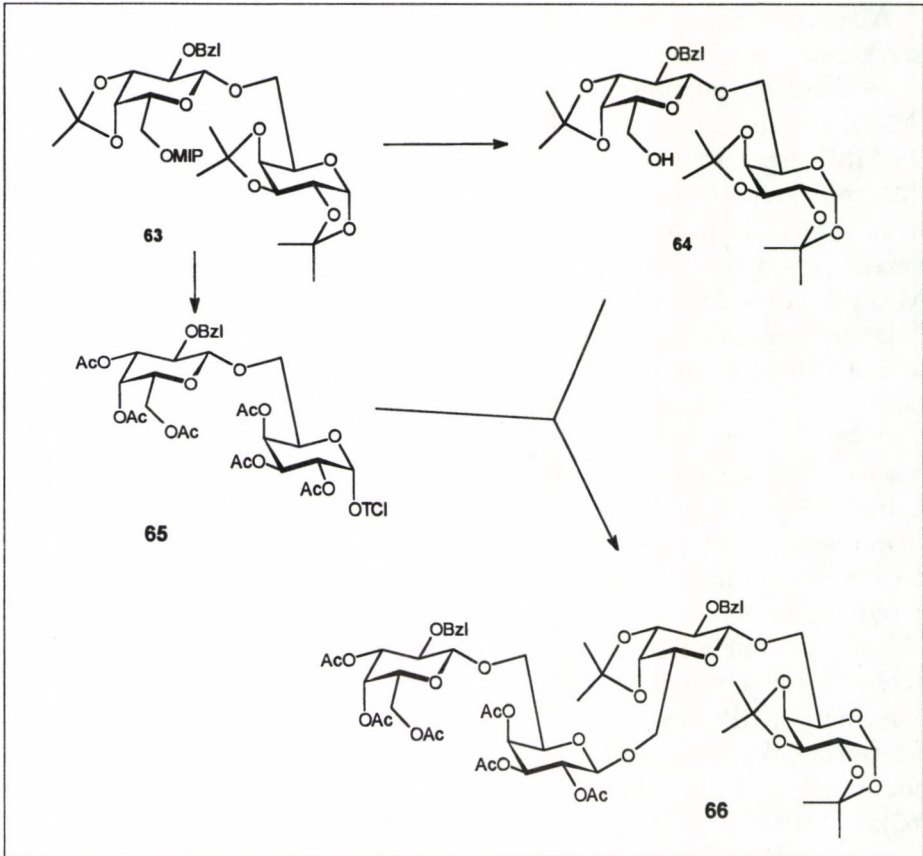
Az arabinogalaktánok fitoalexin-elicitor-hatását vizsgálándó, számos igen hasznos szintetikus intermediert állítottunk elő, amelyekből gyakorlatilag bármilyen kívánt végtermék nyerhető (18. ábra).

A szintetizálható építőelemek szellemesen kombinálhatóak, és biológiai igen értékes, tetszőlegesen variálható szerkezetű modellvegyületekhez juthatunk.

Az itt bemutatott eredményeket 1997-ben a 10. Európai Szénhidrátkémiai Szimpóziumon<sup>29</sup> mutattuk be, ezt követően, 1998 februárjában az alábbi négy



17. ábra. A 60-as vegyület sav katalizálta dimerizációjával létrejött vegyület (62) szerkezete



18. ábra. OH-2'' és OH-2''' származékok előállítására alkalmas védett tetraszacharid (**66**) szintézise

tetraszacharid szintéziséről számoltak be,<sup>30</sup> s a szintéziseket feltételezett fitoalexin-elicitor-hatás motiválta (19. ábra).

A holland szerzők az 1,2-anhidro-cukrok glikozildonátor készségét használták ki, bár e vegyületek szintézise számos lépést igényelt.

## Mesterséges antigének előállítása oltóanyag-termeléshez, illetve diagnosztikai célra

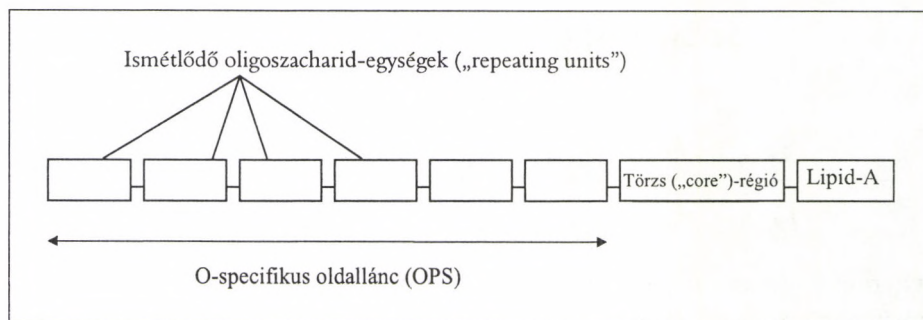
Vírusok, baktériumok emlősszervezetekbe jutva ellenanyag-termelést váltanak ki. A képződő ellenanyagok a mikroorganizmusok felületén lévő epitópokra mint testidegen antigénekre nézve specifikusak. Ezek az ellenanyagok





A kapszuláris poliszacharidok antigén-tulajdonságúak, belőlük vakcinák, oltóanyagok nyerhetők, az első PS-vakcina 1978-ban nyert bevezetést, amely a *Pneumococcus* 17 törzsének poliszacharidját tartalmazta, s az ellenük termelődő ellenanyag nyújtott védelmet ezen baktériumok fertőzésével szemben. Újabban, 1983-tól a 23-as készítmény<sup>33</sup> van forgalomban. PS vakcina áll rendelkezésre *Haemophilus influenzae* b (Hib) ellen is, amely a gyerkek esetében agyhártyagyulladás okozott. További oltóanyag érhető el a *Neisseria meningitidis* A, C, Y és W135 szerocsoportjai és a *Salmonella typhi* ellen. Ezek a tisztán PS vakcinák azonban nem nyújtanak védelmet a csecsemőknek (0,5–2,5 év), ezért vált igen fontossá az a megfigyelés, hogy a fehérje-PS antigének ennek a korcsoportnak is védelmet biztosítanak, s ma a *Vibrio cholera* és a *Streptococcus* B csoportja ellen ilyen vakcinák jelentek meg a piacon.

A Gram-negatív baktériumok lipopoliszacharidjainak szerkezetét a 20. ábra szemlélteti:



20. ábra. Gram-negatív baktériumok lipopoliszacharidjainak (LPS) szerkezete

A szerospecifitást az OPS rész határozza meg, de ezek nem immunogének, csak hapténként működnek. Ellenben az OPS-fehérje-konjugátumok az OPS-re specifikus IgG ellenanyag termelését indukálják, és bizonyos esetekben védelmet nyújtanak a bakteriális fertőzés ellen.

Az AIDS és az angliai szarvasmarha-szivacsos-agyvelőgyulladás kapcsán a tisztán biológiai eredetű mintákkal szemben is fenntartás van. Kedvező eredmények vannak arra vonatkozóan, hogy a bakteriális poliszacharidok „ismétlődő” oligoszacharid egységei alkalmasan választott makromolekulákhoz, elsősorban fehérjékhez kapcsolva olyan mesterséges glikoproteineket adnak, amelyek ellen a szénhidrátokra specifikus IgG antitestek termelődnek.

Ezek a körülmények is motiválták azon döntésünket, hogy a Gram-negatív baktériumok közül a *Shigella sonnei*<sup>34</sup> LPS-ének vizsgálatával és a diszacharid típusú ismétlődő egység szintézisével foglalkozzunk. A shigellosis sajnos igen

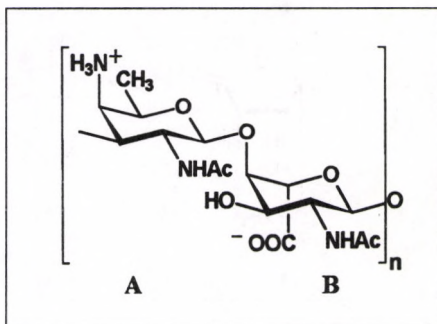


gyakori, az emberi emésztőrendszerre kiterjedő betegség. Az évenkénti fertőzések száma mintegy 300 millió, a tragikus esetek száma is eléri a 600 ezret.

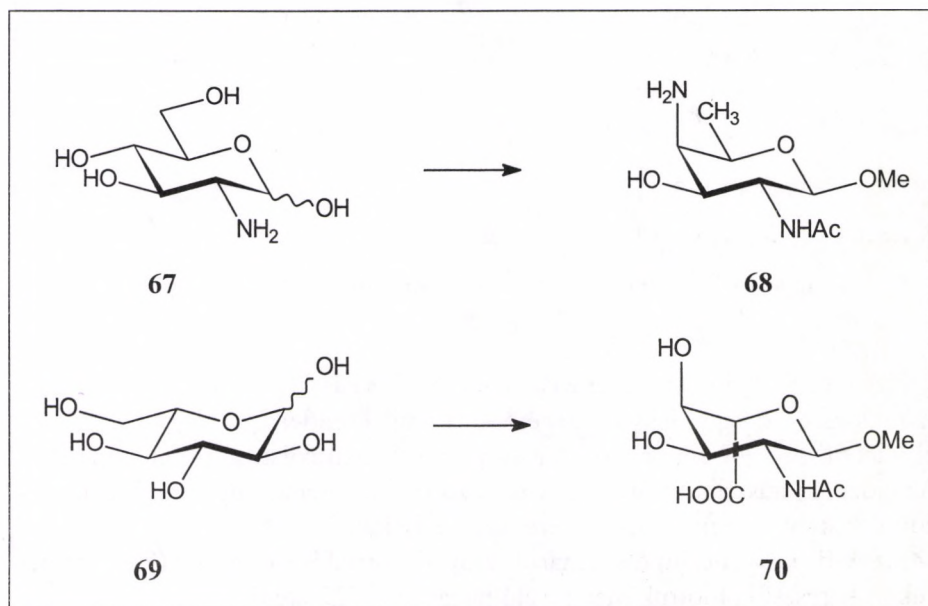
A *Sh. sonnei* ismétlődő diszacharid-egysége a 21. ábra szerinti szerkezettel írható le.

Ismereteink szerint az ismétlődő egység a legbonyolultabb szerkezetű diszacharid-molekula, amely szabad  $\text{NH}_2$ - és  $\text{COOH}$ -csoportja révén zwitter ionos formában létezik, s a monoszacharid építőelemek szintézise sem ismert.<sup>35</sup>

A két monoszacharid építőelem (68 és 70) szintézisét D-glükózaminból (67) és L-glükózból (69) kiindulva oldottuk meg, a részletek ismertetésétől eltekintünk.<sup>36</sup>

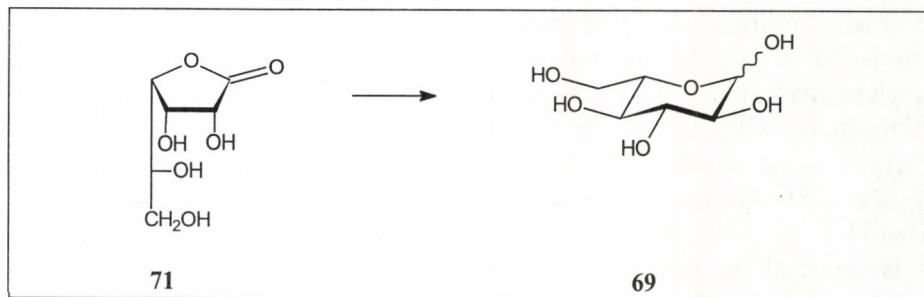


21. ábra. A *Shigella sonnei* Gram-negatív baktérium-OPS-nek ismétlődő, diszacharid egysége



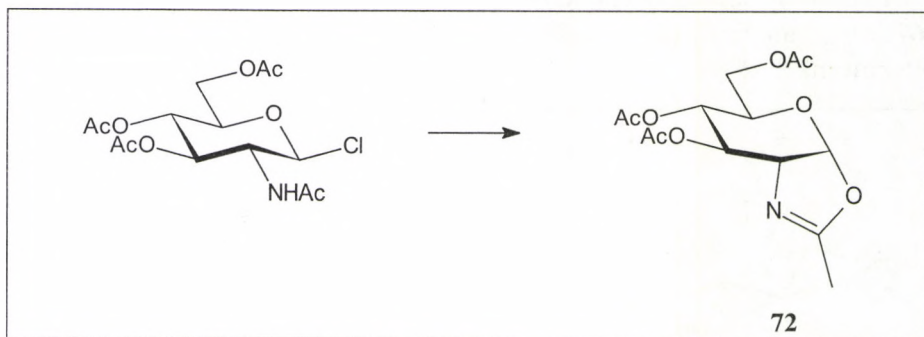
22. ábra. A *Shigella sonnei* OPS építőelemeinek szintézise

Az egyébként igen drága L-glükóz szintézisére is D-gulono- $\gamma$ -laktonból (71) kiindulva új szintézist dolgoztunk ki (23. ábra).



23. ábra. Az *L*-glükóz szintézise

A 2-acetamido-2-dezoxi-glikozidok szintézisét az a körülmény is nehezíti, hogy az 1,2-oxazolin (72) képződésre való hajlam kifejezettebb a glikozid-képzésnél (24. ábra).



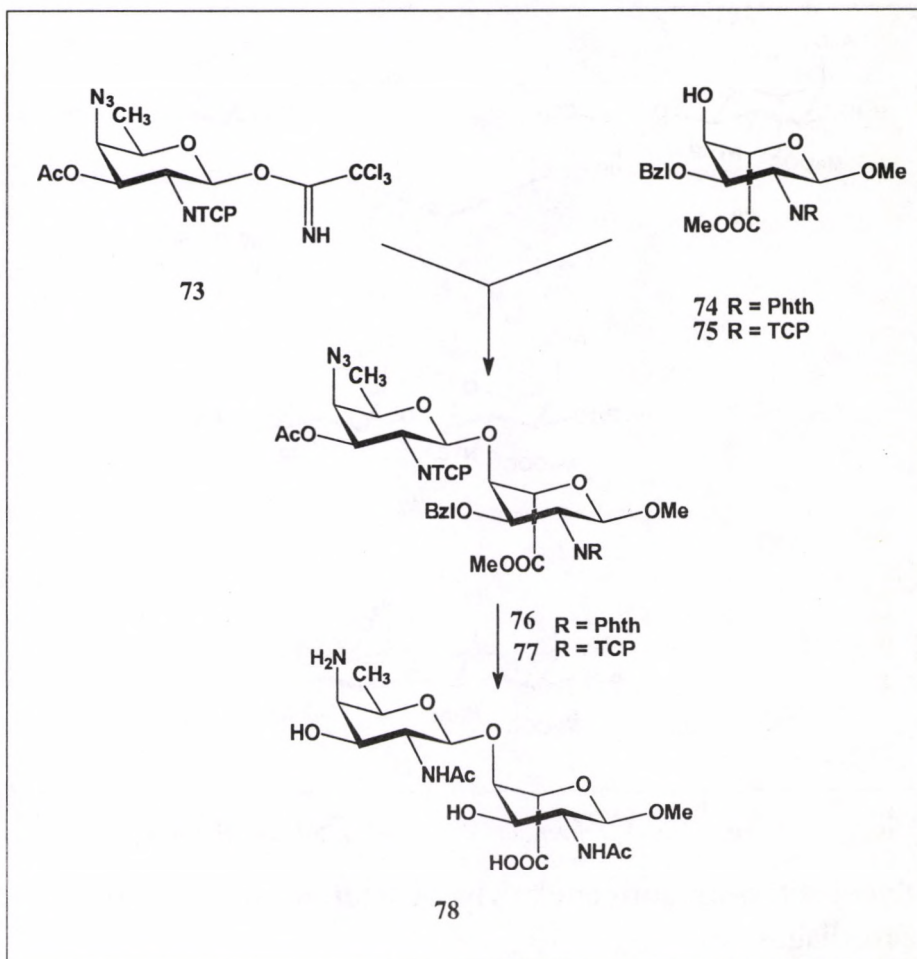
24. ábra. A 2-acetamido cukrok glikozil-donorjai készségesen képeznek 1,2-oxazolinokat

Ezt elkerülendő, az 1,2-**transz** glikozidok kialakítására imideket (ftaloil, tetraklórfaloil) vagy elektronszegény karbonillal rendelkező amidokat (N-triklóracetil, N-trikloretoxikarbonil, N-p-nitrobenziloxikarbonil) alkalmaznak. Az előzőek drasztikus körülmények közötti eltávolítása, míg az utóbbiak túlzott érzékenysége nehezíti a sikeres szintéziseket.

Az A-B szekvenciájú diszacharid szintézisét triklóracetimidát (73) származékon keresztül oldottuk meg kiváló hozammal (25. ábra).

A védett származékok (76 és 77) 78-cá történő átalakítása rendkívül szigorú reakciószekvenciát igényelt (észterhidrolízis, deftaloilezés, szelektív N-acetilzés és redukció). Lényegesen nehezebb feladatnak bizonyult a B-A szekvenciájú diszacharid előállítása. Egyrészt a glikozilezési reakciók hozama lényege-

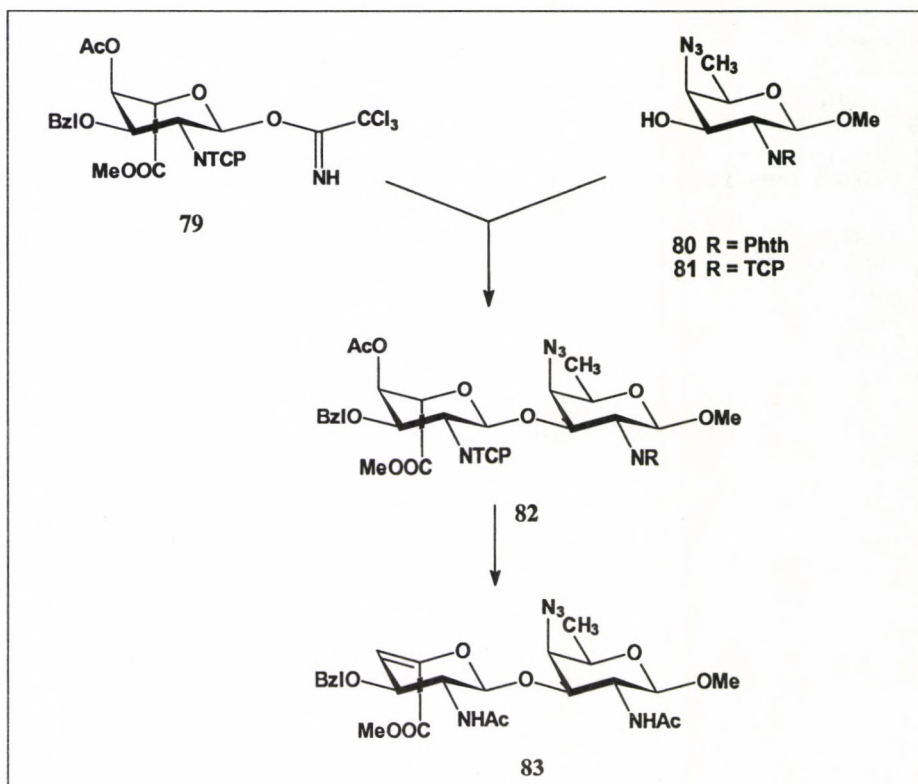




25. ábra. Az A-B sorrendű diszacharid szintézisének lépései

sen kisebb volt, másrészt a védőcsoport eltávolításának előző szekvenciája eliminációs reakciót eredményezett. Ezt elkerülendő, az első lépés az *axiális* 4'-OAc savas feltételek melletti eltávolítása volt (26. ábra).

A ftaloil- (Phth) csoportok eltávolítása során észlelt nehézségek a magasabb tagszámú oligoszacharidok előállításánál, a tetraklórfaloil és a triklóracetil védőcsoportok kombinálását sugallták. Ezen csoportok alkalmazásával 1+2, ill. 2+3 blokk-szintézis révén előállítottunk egy tri- (84) és egy pentaszacharidot (85), ezekből a védőcsoportokat azonban ezideig nem sikerült eltávolítani (27. ábra).



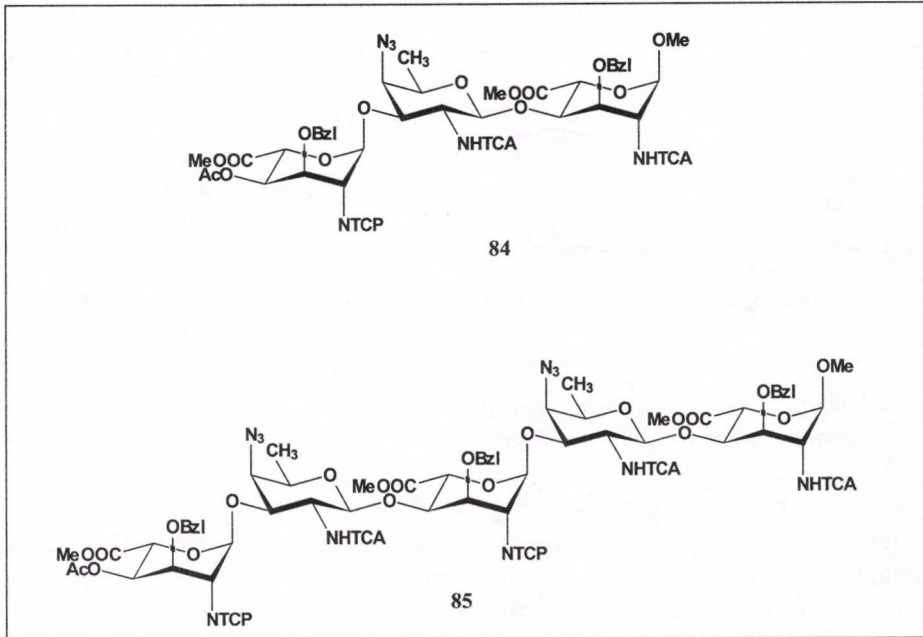
26. ábra. A B-A szekvenciájú diszacharid szintézisének lépései

## Mycobacterium antigének. Mycobacteriális fertőzések szerodiagnózisa

A mycobacteriumok a Gram-pozitív mikroorganizmusokhoz tartoznak, kettő közülük közismert humánpatogén: a *M. tuberculosis* és a *M. leprae*. Az első a tbc-t, míg a második a leprát okozza. Az utóbbi 15 évben az irántuk megnövekvő érdeklődést az ún. opportunista mycobacteriumok által okozott megbetegedések váltották ki, amelyeknek szenvedő alanyai, sok esetben áldozatai a sérült immunrendszerrel rendelkező személyek, főleg AIDS-fertőzöttek, szervátültetésen átesett és immunszuppresszív anyagokkal gyógykezelt betegek.

Közismert a mycobacteriumok ellenálló képessége, amelyet a sejtfalukat körülvevő vastag lipidrétegnek köszönhetnek. A lipidréteg felületén, abba belemerülve, szerospecifitást meghatározó ún. *fenolos glikolipidek*, *glikopeptidolipidek* vagy *lipooligoszacharidok* találhatók.<sup>37,38</sup>



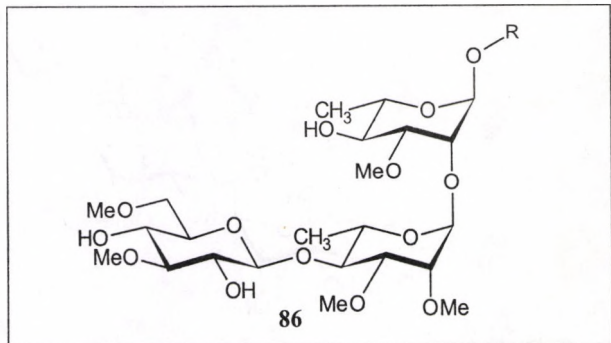


27. ábra. A B-A-B és a B-A-B-A-B tri-(84) és pentaszacharid (85) szerkezete védett formában

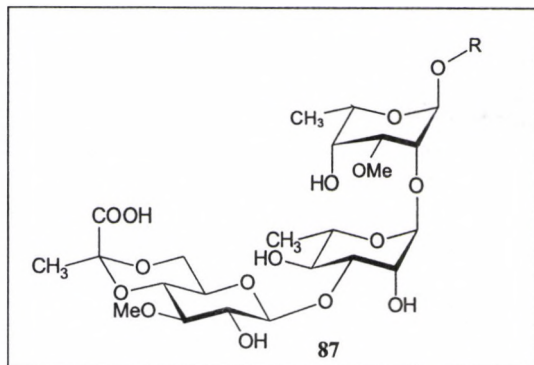
A baktériumfelszín antigének közül elsőként a *M. leprae* fenolos glikolipid-jét izolálták<sup>39</sup> 1981-ben, ma azonban közel 40 szerovariáns antigénjének szerkezetét ismerjük.

A *M. leprae* esetében a WHO által támogatott program során a triszacharid típusú antigén szintézisére is sor került, amelyet proteinhez konjugálva főleg Bangladesben, Indiában és Etiópiában a *M. leprae* által okozott új fertőzések szűrésére használtak fel.

A viszonylag egyszerű szerkezetű triszacharid szintézisét 5 laboratóriumban végezték el,<sup>40-45</sup> 35-37 szintetikus lépéssel nyerték az antigént. Mi egy, az általunk



28. ábra. A *M. leprae* antigénjének szerkezete

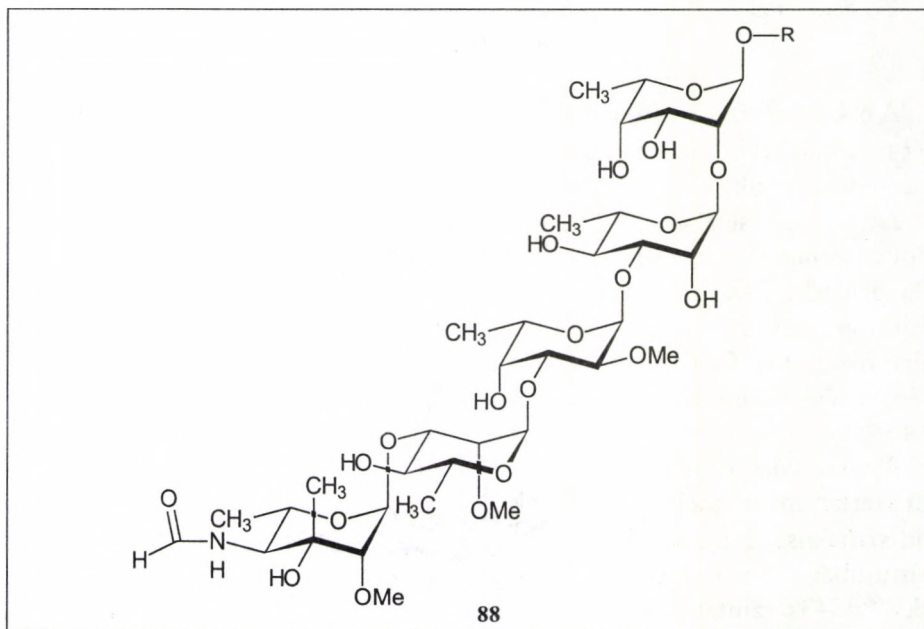


29. ábra. A *M. avium* 8-as szerovariáns triszacharid antigénjének szerkezete<sup>50</sup>

kidolgozott szimmetrikus<sup>46</sup> ketálok hidrogenolízisével a lépések számát 17-re redukáltuk (28. ábra).<sup>47-49</sup>

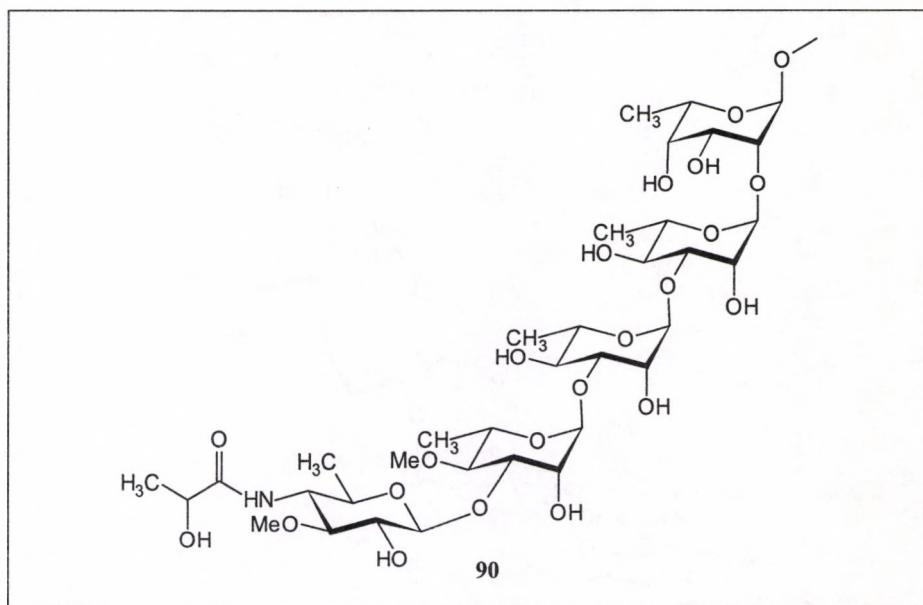
A mycobacterium antigének rendkívül változatos szerkezettel rendelkeznek, különleges szénhidrátokat, királis zsírsavakat, acetálokat és étereket tartalmaznak. Ezek a szerkezetek valóban kihívást jelentenek a kémikus számára, s esetenként a szintetikus kaland még a biológiai attraktivitást is háttérbe szoríthatja.

A kémiai érdekességgel és a biológiai csábítással magyarázható, hogy számos mycobacterium antigén szintézisét valósítottuk meg, többet közülük elsőként. Ezen eredményeket csak képletek bemutatásával vonultatjuk fel a szerkezetek összetettségének illusztrálása céljából (29–32. ábra).

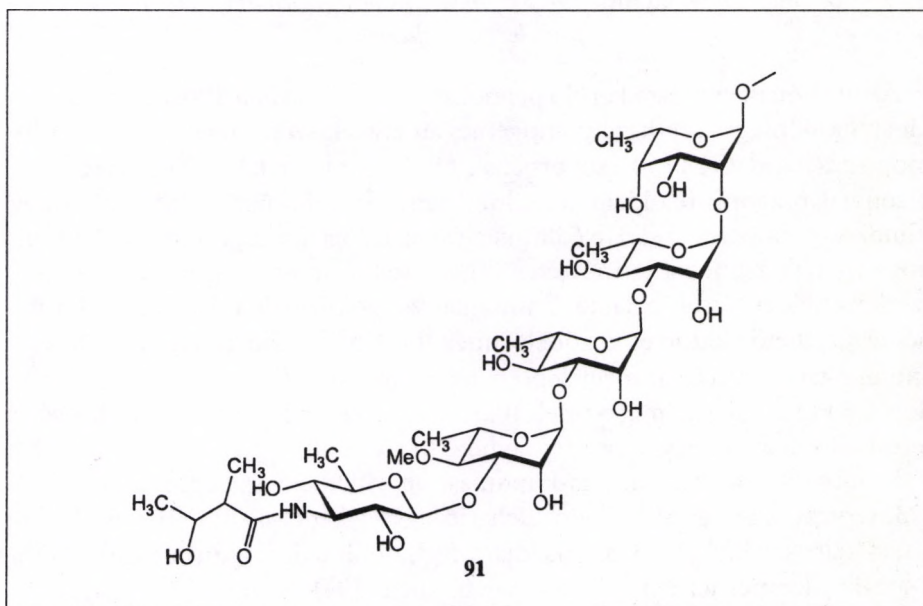


30. ábra. A *M. avium* 14-es szerovariáns pentaszacharid antigénjének szerkezete<sup>51</sup>

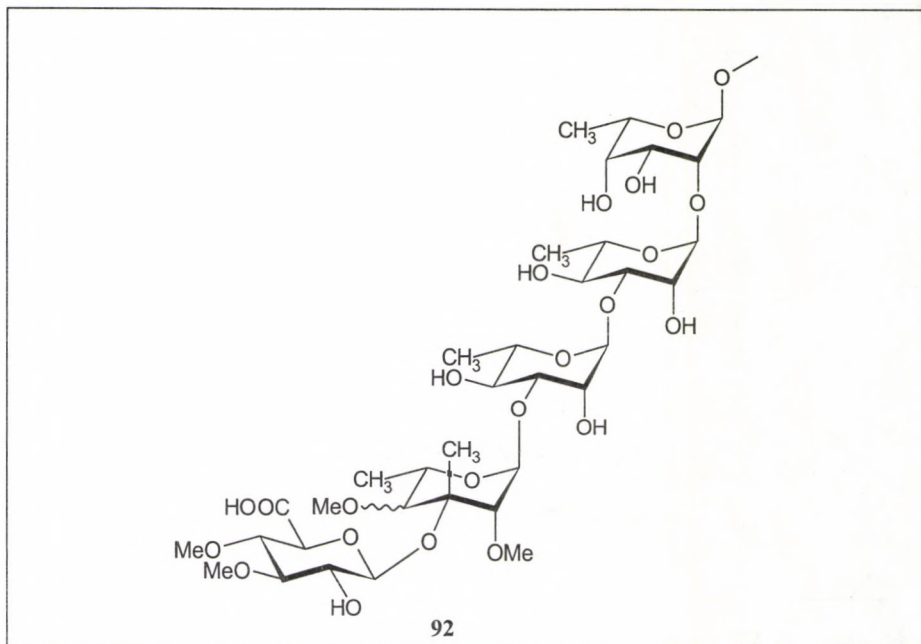




31. ábra. A *M. avium* 12-es szerovariáns pentaszacharid antigénjének szerkezete



32. ábra. A *M. avium* 17-es szerovariáns pentaszacharid antigénjének szerkezete

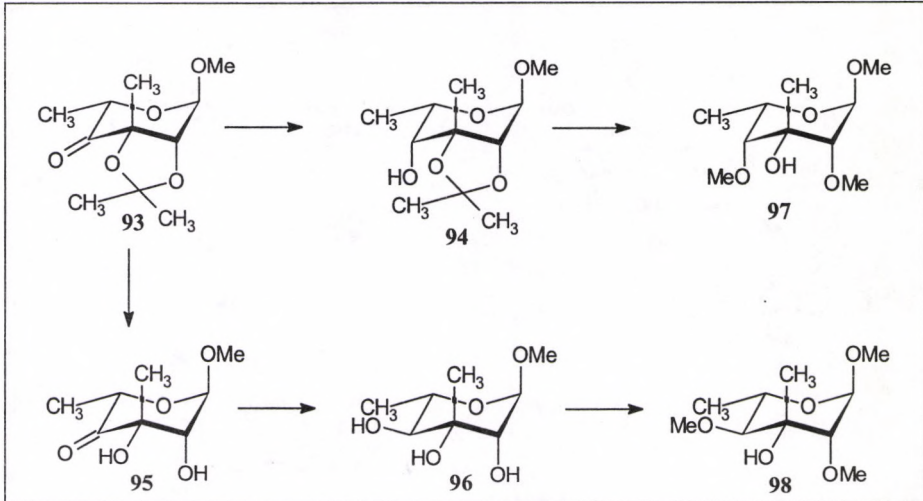


33. ábra. A *M. avium* 19-es szerovariáns pentaszacharid antigénjének feltételezett szerkezete

Az utolsónak emítésre kerülő pentaszacharid a *M. avium* 19-es szerovariánsának<sup>52</sup> különleges szerkezetű antigénje, amelynek szerkezetében a negyedik monoszacharid  $\text{OCH}_3$ -4 csoportjának térállása bizonytalan. Szintézisével e bizonytalanságot is feloldani készültünk. Eredeti célkitűzésünk az volt, hogy mindkét pentaszacharidot előállítsuk, és szerológiai vizsgálattal döntjük el, hogy melyik azonos a természetes vegyülettel. Fontos megjegyezni, hogy a szerkezetfelderítéssel foglalkozó amerikai szerzők izolálták a pentaszacharidból levezethető alditot, és közzétették ennek  $^1\text{H}$ -NMR spektrumát, amelynek az anomer-tartományában megjelenő négy proton közül három csatolási állandója 1,5 Hz körül van, míg egynek 10,5 Hz az értéke, az utóbbi egyértelműen a terminális uronsav egységhez rendelhető (33. ábra).

Korábbi szintéziseinknél is kiindulási vegyületként szereplő 4-ulozidot<sup>24</sup> (93) terveztük a negyedik monoszacharid-egység két C-4 epimerjének előállítására felhasználni. A 93 redukciója a legkülönbözőbb redukálószerrel a 4-axiális izomerhez, az *L-talo*-vegyülethez (94) vezetett. A nagyfokú sztereoszelektivitás a hidrid anionnak a legkevésbé gátolt  $\alpha$ -L oldalról történő támadásával értelmezhető. Az *L-ramno* izomert (96) az ulóz (93) izopropilidén





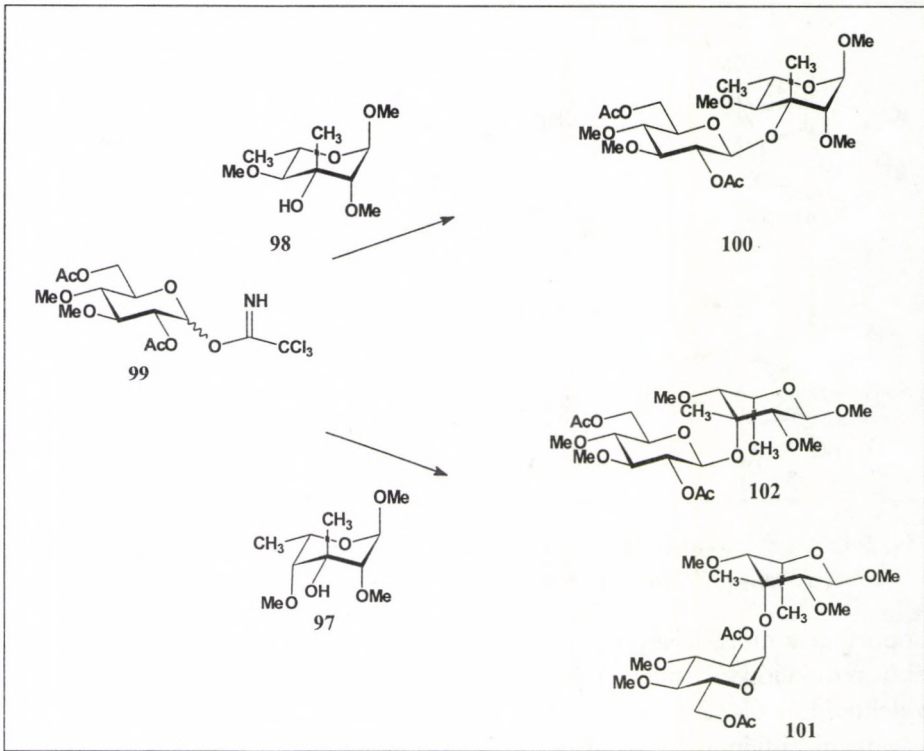
34. ábra. A *M. avium* 19-es szerovariáns pentaszacharid antigénjében feltételezett  $\alpha$ -L-talo-(97), ill.  $\alpha$ -L-ramno-(98) szerkezetű aglikonok szintézise

csoportjának hidrolízisével nyerhető vegyület (95) triacetoxibórhidriddel történő redukciójával sikerült kvantitatív hozammal nyerni. Ez a sztereoszелеktivitás a C-2,3 hidroxilcsoportjainak komplexképző tulajdonságával és a reagens hidridjének  $\beta$ -L oldalról való támadásával magyarázható.<sup>53,54</sup>

A 94 és 96 vegyületeket hagyományos reakciósorokon keresztül alakítottuk 2,4-di-O-metil-éterekké (97 és 98) (34. ábra).

Mindkét 2,4-di-O-metil-éter (97 és 98)  $^4C_1$  (L) konformációban létezik. Ezeket 2,6-di-O-acetil-3,4-di-O-metil- $\alpha$ ,  $\beta$ -D-glükopiranozil triklóracetimidáttal (99) glikozileztük. Az L-ramno-izomer (98) glikozilezésénél csak egyetlen anomert (100) nyertünk, amely  $\beta$ -glükopiranozidnak bizonyult, s a  $^3J_{1,2} = 1,5\text{ Hz}$  csatolási állandója a redukáló vég változatlan  $^4C_1$ (L) konfigurációját erősíti meg.

Teljesen ellentétes kép adódott a 97 és az imidát (99) kapcsolása esetén. Először is két termék képződött, ezek az interglikozidos kötés vonatkozásában  $\alpha$ -(101), ill.  $\beta$ -anomereknek (102) bizonyultak. A meglepő észlelés azonban az volt, hogy az aglikonként szereplő talo-származék  $^4C_1$ (L) konformációba ment át, s ez az átmenet igen kifejezetten tükröződött a termékek  $^1\text{H-NMR}$  spektrumaiban, ugyanis a  $^3J_{1,2}$  4 Hz csatolási állandóval jelentkezett, a kiindulási 1,5 Hz-es csatolási állandóval szemben, így a  $\beta$ -interglikozidos kötés  $\sim 8\text{ Hz}$ -es kapcsolási állandója mellett egy másik viszonylag nagy csatolási állandó jelentkezett. Ez a tény azt sugallta, hogy ezen utóbbi talo-komponens nem lehet a



35. ábra. A *M. avium* 19-es szerovariáns pentaszacharid terminális diszacharidjainak (**100** és **102**) szintézise

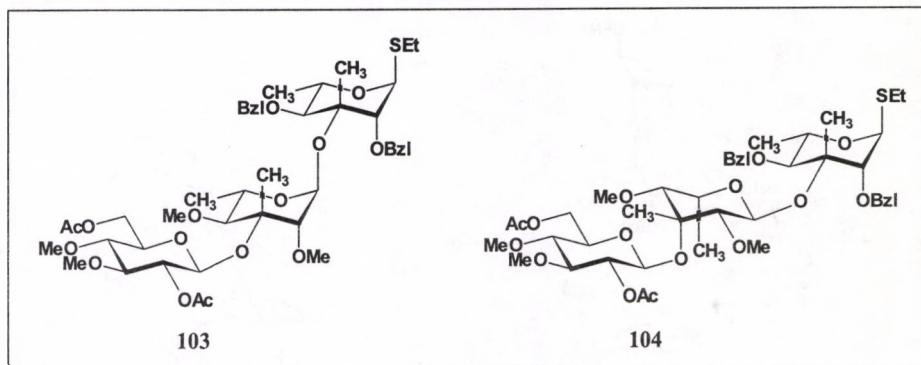
természetes pentaszacharidban, ugyanis ott egyetlen nagy csatolási állandó szerepelt, s az a terminális glükuronid egységhez volt rendelhető.

Ezen utóbbi glikozilezési reakcióban jelentkező  $\alpha/\beta$ -anomerkeverék és az aglikon konformációváltása, csak a *talo*-származék sztérikus zsúfoltságával magyarázható (35. ábra).

Annak bizonyítására, hogy a 2,4-di-O-metil-*talo* származék abban az esetben is megtartja a  $^4C_1-L$  konformációját, ha a pentaszacharid terminális triszacharid egységében foglal helyet, a két diszacharid-származékot (**100** és **102**) uroniddá történő transzformációja után glikozil donorra alakítottuk és triszacharidokká kapcsoltuk etil 2,4-di-O-benzil-1-tio- $\alpha$ -L-ramnopiranozidot használva aglikonként.

A dimetil-*ramno*-egységet tartalmazó triszacharid (**103**)  $^1H$ -NMR spektrumában egy nagycsatolású anomer szignál mellett, két kiscsatolású anomer jelet találtunk, összhangban a természetes pentaszacharidból izolált alditol anomer





36. ábra. Terminális triszacharidok szerkezete

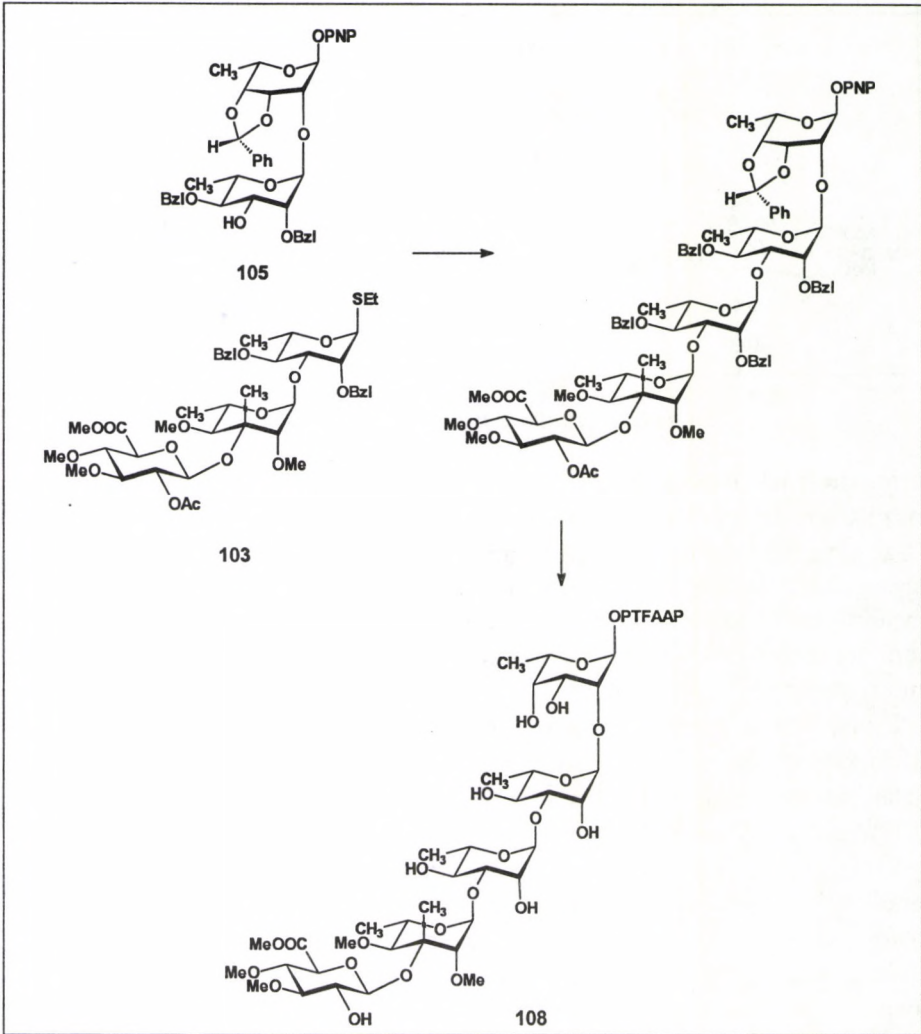
tartományának jelösztetélével. Ezzel szemben a dimetil-*talo*-egységet tartalmazó triszacharid (**104**)  $^1\text{H-NMR}$  spektruma anomertartományában mindössze egyetlen 1,5 Hz nagyságú szignált találtunk, ami a redukálóegység *ramno* egységéhez volt rendelhető. Azaz, amit már a diszacharidok szerkezetvizsgálataival valószínűsíthettünk, nevezetesen, hogy a természetes pentaszacharidban nem lehet 2,4-di-O-metil-*talo* építőelem, az triszacharid-szinten egyértelműen igazolódott (36. ábra).

E vizsgálatok alapján a **103**-as triszacharidot egy diszacharid aglikonnal<sup>55</sup> (**105**) kapcsoltuk, majd a védőcsoportok eltávolítása, ill. az aromás aglikon átalakítása után a hídmolekulával (spacer) ellátott pentaszacharid származékot (**108**) kaptuk (37. ábra).

Székfoglaló előadásom célja az volt, hogy részleteket villantson fel azokról a rendkívül sokrétű és részleteiben igen bonyolult biológiai felismerési folyamatokról, amelyekben a szénhidrátok szerepének felderítése napjainkban folyik. A szintetikus szénhidrátkémia igen gazdag szintetikus arsenáljának eszközeivel kíván hozzájárulni a különböző tudományágak képviselőinek együttes erőfeszítéséhez. Néhány szerény eredményünkkel talán nekünk is lehetőségünk nyílt arra, hogy a folyamatot felgyorsíthassuk, e tudományos kaland aktív résztvevői lehessünk.

## Köszönetnyilvánítás

A kísérletes tudományok területén ma már csak harmonikusan együttműködő csoportok tudnak a siker reményében kutatásokat folytatni és eredményeket elérni. Így volt ez esetemben is. Megkülönböztetett tisztelettel köszönöm tanítómestereim, néhai dr. Bognár Rezső akadémikus úrnak és dr. Nánási Pál



37. ábra. A *M. avium* 19-es szerovariáns pentaszacharid antigénjének szerkezete

professzor úrnak önzetlen segítségét és támogatását. Ugyancsak hálásan köszönöm közvetlen munkatársaim lelkesedését és erőfeszítését, akiknek neve közleményeink szerzői között feltüntetésre került.

Az igen költséges kutatásokat támogatta a Magyar Tudományos Akadémia, az OTKA, az MKM és az OMFB. Külföldi támogatóim közül hálásan köszönöm a Howard Hughes Medical Institute (USA), a Mizutani Alapítvány (Japán) és a Volkswagen Alapítvány (Németország) anyagi segítségét.



## Irodalom

1. Landsteiner, K.: *Zentr. Bakteriolog.*, 27 (1900) 357.
2. Pusztai, A., Morgan, T. J.: *Nature*, 182 (1958) 648.
3. Rademacher, T. W., Parekh, R. B., Dwek, R. A.: *Ann. Rev. Biochem.*, 57 (1998) 785.
4. Lasky, L. A.: *Science*, 258 (1992) 964.
5. Blithe, D. L.: *Trends in Glycoscience & Glycotechnol.*, 5 (1993) 81.
6. Schmidt, R. R.: *Angew. Chem.*, 98 (1986) 213.
7. Greenberger, N. J., Toskes, P. P.: Disorders of the Pancreas, *Harrison's Principles of Internal Medicine*, 12th ed., Vol. 2, New York, McGraw-Hill, 1991 1369.
8. Kaufman, R. A., Dunka, L. J., Hall, L. M.: *Clin. Chem.*, 26 (1980) 1018.
9. Henkel, E., Morich, S., Henkel, R.: *J. Clin. Chem. Clin. Biochem.*, 22 (1984) 489.
10. Farkas, E., Jánosy, L., Harangi, J., Kandra, L., Lipták, A.: *Carbohydr. Res.*, 303 (1997) 407.
11. Kandra, L., Gyémánt, Gy., Farkas, E., Lipták, A.: *Carbohydr. Res.*, 298 (1997) 237.
12. Marr, A. M. S., Donald, A. S. R., Morgan, W. T. J.: *Biochem. J.*, 110 (1968) 789.
13. Yang, H., Hakomori, S.: *J. Biol. Chem.*, 246 (1971) 1192.
14. Rauvala, H.: *J. Biol. Chem.*, 251 (1976) 7517.
15. Hanisch, F., Uhlenbruck, G., Dienst, C.: *Eur. J. Biochem.*, 144 (1984) 467.
16. Fukuda, M.: *Biochem. Biophys. Acta*, 780 (1985) 119.
17. Holmes, E. H., Ostrander, G. K., Hakomori, S.: *J. Biol. Chem.*, 261 (1986) 3737.
18. Philips, M. L., Nudelman, E., Gaeta, F. C. A., Perez, M., Singhal, A. K., Hakomori, S., Paulson, J. C.: *Science*, 250 (1990) 1130.
19. Goelz, S. E.: *TIGG*, 4 (1992) 14.
20. Mulligan, M. S., Paulson, J. C., DeFrees, S., Zheng, Z. L., Lowe, J. B., Ward, P. A.: *Nature*, 364 (1993) 149.
21. Uchiyama, T., Woltering, T. J., Wong, W., Lin, C. C., Kajimoto, T., Takebayashi, M., Weitz-Schmidt, G., Asakura, T., Noda, M., Wong, C. H.: *Bioorg. Med. Chem.*, 4 (1996) 1149.
22. Procter, J. C., Bamford, M. J., Bird, M. I., Gore, P. M., Holmes, D. S., Priest, R., Saez, V.: *Bioorg. Med. Chem.*, 4 (1996) 793.
23. Wong, C. H., Moris-Varas, F., Hung, S. C., Marron, J. G., Lin, C. C., Gong K.W., Weitz-Schmidt, G.: *J. Am. Chem. Soc.*, 119 (1997) 8152.
24. Klemer, A., Beermann, H.: *J. Carbohydr. Chem.*, 2 (1983) 457.
25. Wadsworth, W. S., Emmons, W. D.: *J. Am. Chem. Soc.*, 83 (1961) 1733.
26. Albersheim, P., Valent, B. S.: *Cell. Biol.*, 78 (1978) 627.
27. Lipták, A., Fügedi, P., Kerékgyártó, J., Nánási, P.: *Carbohydr. Res.*, 113 (1983) 225.
28. Barili, P. L., Berti, G., Catelani, G., Colonna, F., Marra, A.: *Tetrahedron Lett.*, 27 (1986) 2307.
29. Lipták, A., Jánosy, L.: Abstracts – *eurocarb*, – Utrecht (1997) A 62, 142.
30. Timmers, C. M., Wigchert, C. M., Leeuwenburgh, M. A., van der Marel, G. A., van Boom, J. H.: *Eur. J. Org. Chem.*, (1998) 91.
31. Jennings, H. J.: *Curr. Top. Microbiol. Immunol.*, 150 (1990) 97.
32. Zähringer, U., Lindner, B., Rietschel, E. Th.: *Adv. Carbohydr. Chem. Biochem.*, 50 (1994) 211.
33. Mitchell, T. J., Andrew, P. W.: *Molecular and clinical aspects of bacterial vaccine development* (Eds.: Ala'aldin, D. A. A., Hormaeche, C. E.) John Wiley & Sons, 1995. 93.

34. Kontrohr, T.: *Carbohydr. Res.*, 58 (1977) 498.
35. Batta, Gy., Lipták, A., Schneerson, R. Pozsgay, V.: *Carbohydr. Res.*, 305 (1998) 93.
36. Medgyes, A., Farkas, E., Lipták, A. Pozsgay, V.: *Tetrahedron*, 53 (1997) 4159.
37. Lipták A., Borbás, A., Bajza, I.: *Med. Res. Rev.*, 14 (1994) 307.
38. Aspinall, G. O., Chatterjee, D., Brennan, P. J.: *Adv. Carbohydr. Chem. Biochem.*, 61 (1995) 169.
39. Hunter, S. W., Brennan, P. J.: *J. Bacteriol.*, 147 (1981) 728.
40. Fujiwara, T., Hunter, S. W., Cho, S.-N., Aspinall, G. O., Brennan, P. J.: *Infect. Immun.*, 43 (1984) 245.
41. Gigg, J., Gigg, R., Payne, S., Conant, R.: *Chem. Phys. Lipids*, 35 (1985) 299.
42. Fujiwara, T., Aspinall, G. O., Hunter, S. W., Brennan, P. J.: *Carbohydr. Res.*, 163 (1987) 41.
43. Fujiwara, T., Izumi, S.: *Agric. Biol. Chem.*, 51 (1987) 2539.
44. Chatterjee, D., Cho, S.-N., Stewart, C., Douglas, J. T., Fujiwara, T., Brennan, P. J.: *Carbohydr. Res.*, 183 (1988) 241.
45. Marino-Albernas, J., Verez-Bencomo, V., Gonzalez-Rodriguez, L., Perez-Martinez, C. S., Gonzalez-Abreu Castell, E Gonzalez-Segredo, A.: *Carbohydr. Res.* 183 (1988) 175.
46. Borbás, A., Lipták, A.: *Carbohydr. Res.*, 241 (1993) 99.
47. Hajkó, J., Borbás, A., Lipták, A., Kajtár-Peredy, M.: *Carbohydr. Res.*, 216 (1991) 413.
48. Borbás, A., Hajkó, J., Kajtár-Peredy, M., Lipták, A.: *J. Carbohydr. Chem.*, 12 (1993) 191.
49. Lipták, A.: *Magyar Kémikusok Lapja*, 48 (1993) 229.
50. Bajza, I., Kerékgyártó, J., Hajkó, J., Szilágyi, L., Lipták, A.: *Carbohydr. Res.*, 253 (1994) 111.
51. Bajza, I., Kövér, K. E., Lipták, A.: *Carbohydr. Res.*, 308 (1998) 247.
52. Chatterjee, D., Bozic, C., Aspinall, G. O., Brennan, P. J.: *J. Biol. Chem.*, 263 (1988) 4092.
53. Bajza, I., Borbás, A., Hajkó, J., Lagas, R., Szabovik, G., Varga, Zs., Lipták, A.: *Magyar Kémikusok Lapja*, 51 (1996) 464.
54. Gyergyói, K., Tóth, A., Bajza, I., Lipták, A.: *Synlett*, (1998) 127.
55. Kerékgyártó, J., Szurmai, Z., Lipták, A.: *Carbohydr. Res.*, 245 (1993) 65.



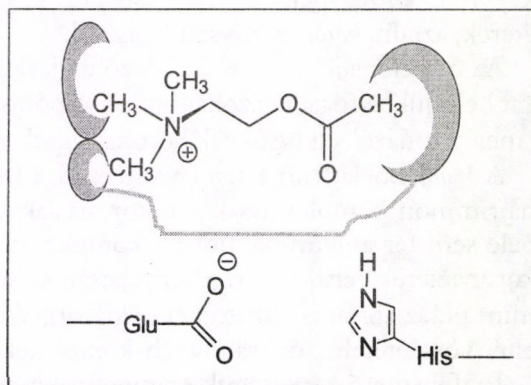
Tőke László  
az MTA rendes tagja

# SZUPRAMOLEKULÁRIS KÉMIA; KORONAÉTEREK

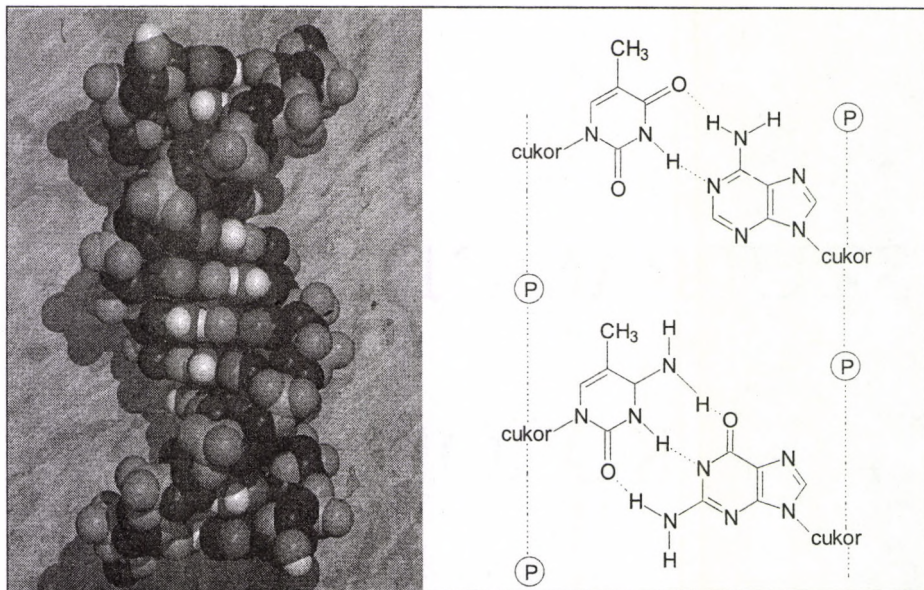
Elhangzott 1998. szeptember 22-én

A természet s ezen belül az élet titkainak kiderítésében nem kis részben a *szupramolekuláris kémia-terület*<sup>1</sup> megjelenésének köszönhetően a kémia bámulatos fejlődést mutatott az utóbbi pár évtizedben. A *szupramolekuláris kémia* tárgya a szupermolekula, olyan két vagy több stabilis kémiai részecskéből létrejött asszociátum, melyet nem kovalens, hanem ún. szekunder erők tartanak össze. Létrejöttükben a *molekuláris felismerés* és az ezzel csaknem szinonim fogalom, az *önrendeződés* játszik szerepet; pl. az enzim aktív helye vagy egyéb fehérjemolekula receptor helye „felismeri” és szelektíven köti meg szekunder erők révén a szubsztrátummolekulát.

Az 1. ábrán a „hírvívő” acetil-kolin kötődését szimbolizáltuk a kolinerg rendszer nikotin típusú receptorán; a receptorhely hidrofób részéhez kötődik a két metilcsoport,



1. ábra



2. ábra

az ammóniumionnal a receptor fehérje glutamát egysége tart ionviszonyt, hisztidin egysége pedig az észter-karbonilhoz kapcsolódik hidrogénhíd kötéssel.

Hasonlóképpen a citozin a guanint, az adenin pedig a timint „ismeri fel” és „köti meg” a DNS-duplexben (2. ábra).

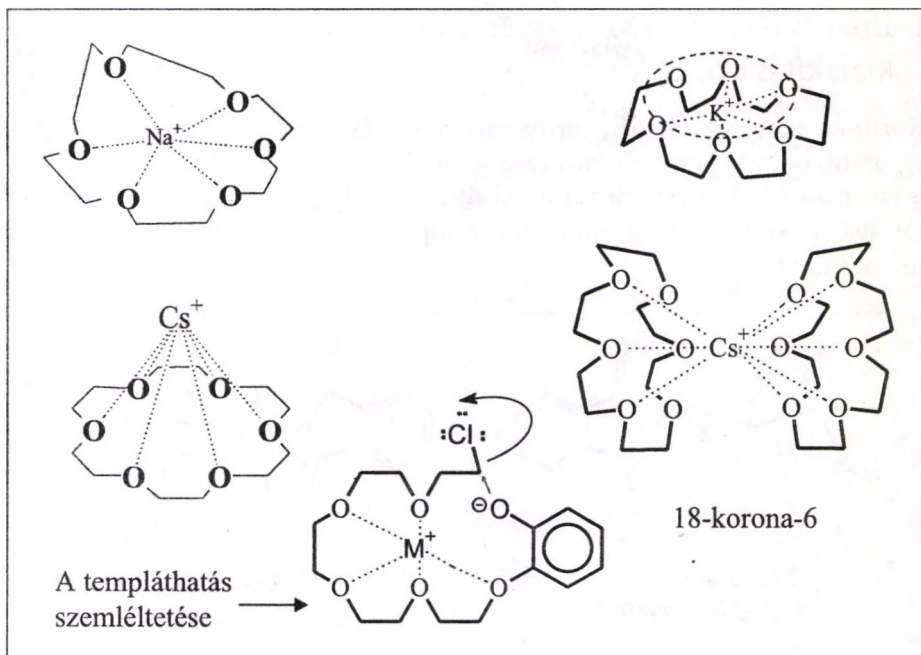
Ennek az élet szempontjából is alapvető jelentőségű jelenségcsoportnak a tanulmányozásához az olcsó, viszonylag egyszerű, szintetikus modellek első képviselőit 1967-ben Pedersen felfedezése szolgáltatta a makrociklusos poliéterek, az ún. *koronaéterek* szintézisével.<sup>2</sup>

Az összefoglaló nevet is felfedezőjük javasolta arra utalva, hogy a fémionokat belsejükbe fogadó, azokat ott ion-dipólus kapcsolatokkal rögzítő, mintegy „megkoronázó” ciklusoknak koronaalakjuk van.

A 3. ábrából látható, hogy így van ez pl. a 18-korona-6 kálium-komplexénél, nátriumion komplexálásakor e koronaalak kissé torzul, a cézium-ion pedig bele sem fér a gyűrűbe, noha a komplex itt is vitathatatlanul létrejön. Ha a koronaéterek belső átmérője lényegesen különbözik a komplexálandó ionétól, mint pl. az ábrán is látható két példában, akkor változatos alakzatú és 1:1-től eltérő összetételű, ún. sandwich-komplexek képződnek.

Ionfelismerő képességük számszerű kifejezésére a *komplex-stabilitási állandók*, ill. az ezek hányadosaként nyerhető *ionszelektivitási állandók* szolgálnak.





3. ábra. Koronavegyületek komplexei fémionokkal

Előállításukban az elfogadható, sőt jó termelést az ún. *templáthatás* biztosítja; azaz a szubsztrátum és a reagens a kialakítandó gyűrű mérete szerint megválasztott fémion köré csavarodik a reakció folyamán, megnövelve így a kívánt irányú reakció valószínűségét a lineáris láncmolekulákat eredményező reakcióéhoz képest. A templáthatásnak is központi szerepe van a szupramolekuláris kémiában s az életfolyamatokban is. Elég itt arra utalnom, hogy pl. a DNS replikációjában a DNS saját templátjaként funkcionál.

Az idő rövidsége miatt nem beszélhetek arról, hogy a céljainkhoz illeszkedő, speciális felépítésű koronavegyületeinket, munkánk többszáz tagú szerzőcsapatunkat hogyan szintetizáltuk. Helyette viszont részletesebben ismertethetem a velük elért *eredményeket három részre tagolódóan*.

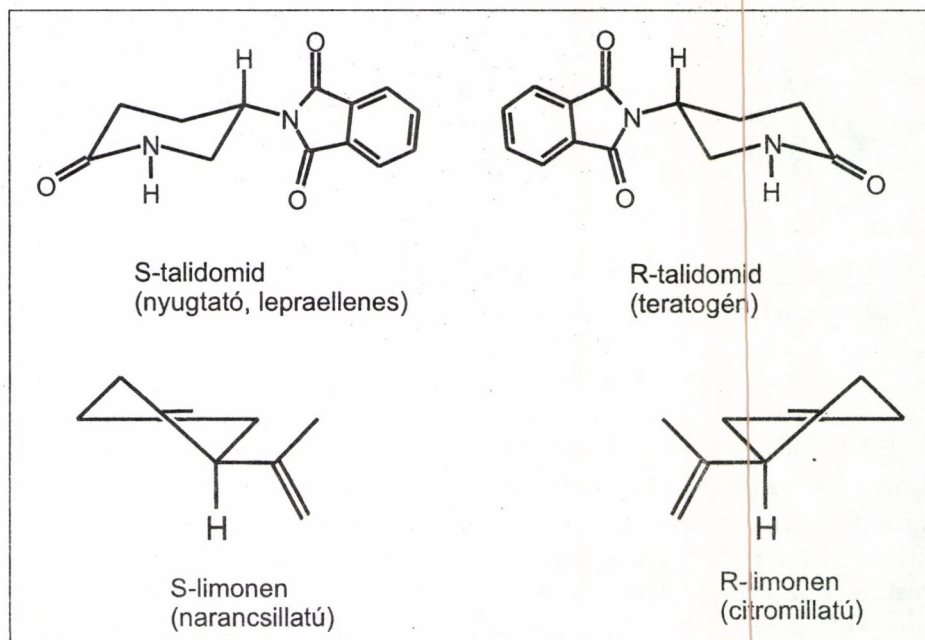
I. Az első részben az *Enantioszelektív szén–szén és szén–hidrogén kötés kialakításáról* lesz szó királis koronakatalizátorok jelenlétében.

II. Majd röviden említést teszünk egy régebben kezdett, de még ma is lendületesen kutatott területről, az *Ionszelektív ligandumok kutatásáról ionszelektív membránelektrodok számára*.

III. S végül ismertetem *Sójellegű farmakonok tökéletes molekuláris „csomagolására”* irányuló erőfeszítéseinket.

## I. Enantioszelektív szén–szén és szén–hidrogén kötés kialakításáról

Korunk parancsa biológiai, környezetvédelmi és gazdaságossági szempontból egyaránt, hogy gyógyszer-alapanyagok, de még az illatszer-alapanyagok esetén is racemátok helyett a kívánt antipód állíttassék elő. A biológiai szempont fontosságát a tiszta antipód alkalmazása szempontjából a 4. ábrán látható példával mutatom be.



4. ábra. Antipódok biológiai hatása

Az R-limonen citromillatú, míg az S-antipód narancsillatú. Még drámaibb lehet a különbség a hatásban, pl. *talidomid*-antipódok esetén; az S-antipód nyugtató, ill. lepraellenes hatású, míg R-antipódja teratogén hatású, és erre ezernyi tragikus sorsú csecsemő világrajötte után ébredtek rá.

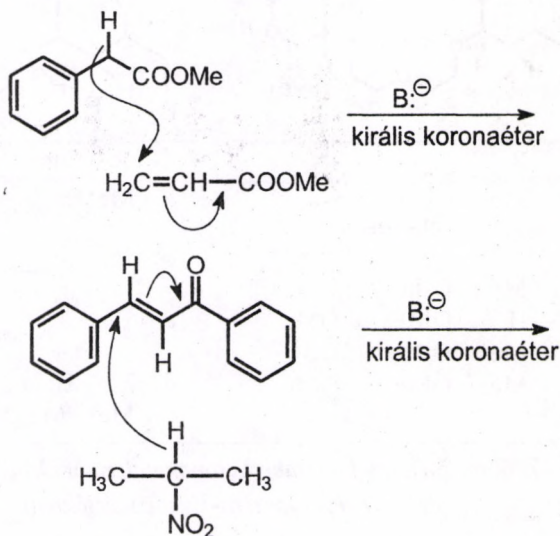
Az antipód tisztán történő előállításának legfontosabb útja az enantioszelektív szintézis. Mi a szintézisekben használatos szén–szén és szén–hidrogén-képződési reakciók közül a *Michael*-reakció két típusát és a *Darzens*-kondenzációt, a CH-kötés kapcsán pedig a deracemizációt tanulmányoztuk (5. és 6. ábra).

Az 7. ábrán e reakciókhoz katalizátorként használt *királis koronavegyületek* két alaptípusát mutatom be.



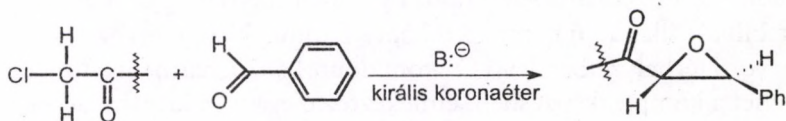
### C–C kötés képződése

A Michael-reakció  
két típusa



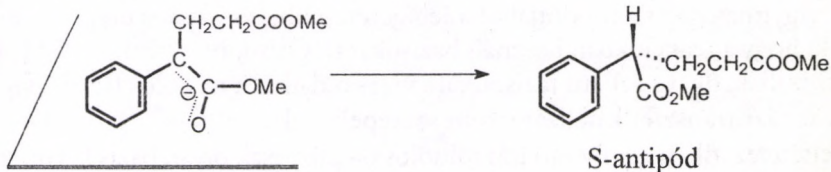
### C–C kötés képződése

Darzens-kondenzációban

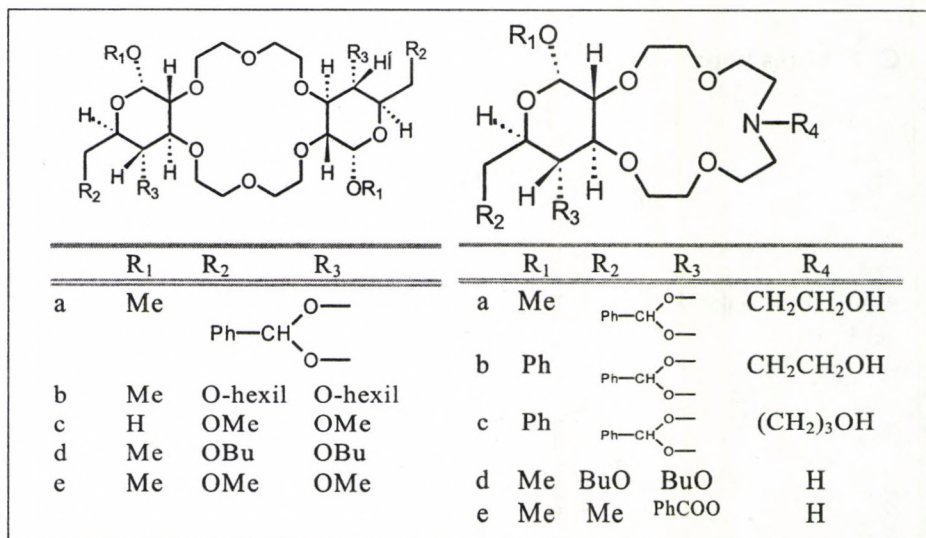


### C–H kötés képződése

Deracemizáció



5–6. ábra. Enantioszelektív C–C és C–H-kötés kialakítása királis koronakatalizátorral



7. ábra. Néhány fontosabb koronakatalizátor Michael-reakciókban és Darzens-kondenzációkban

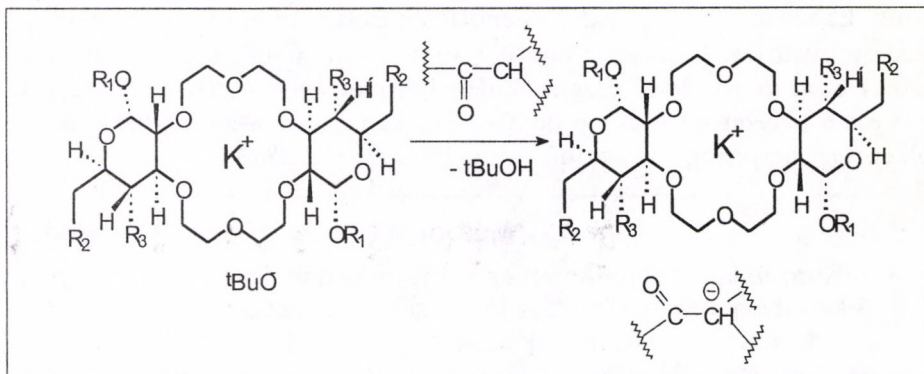
Az egyik csoport képviselői 18-korona-6 gyűrűt tartalmaznak, s ehhez annellálódik két glükóz, galaktóz vagy mannóz különböző szubsztituensekkel a lipofilitás változtatására. Minthogy ezek a molekulák rotációs szimmetriaelemet mutatnak ( $C_2$ -tengelyük van), nagymértékű aszimmetriás indukciót várunk tőlük.

A másik, az ún. azalariát-éter típus ilyen szimmetriát ugyan nem mutat, de nagy stabilitási állandójú komplexet képez fémionokkal, mert az oldalláncukban kedvező térhelyzetben lévő O-atom donorként, a harmadik dimenzióban részt vehet a komplexképzésben, emlékeztetve ezáltal a kriptánsok komplexképzésére.

Fontos hangsúlyozni, hogy e királis segédanyagokat csak katalitikus mennyiségben, néhány mol%-ban alkalmaztuk, lévén, hogy ez a módszer a gazdaságosság és a nagyíthatóság szempontjából a legígéretesebb, és azt a szerepet szántuk nekik, hogy a reakciókban használt bázisokat (KOtBu, NaOtBu, NaOH, KF) lipofilizálják, őket a szilárd fázisból, ill. vizes oldatból a toluolos fázisba vigyék át, azaz fázistranszfer katalizátorként szerepeljenek.

Feltételezzük, hogy így módon toluolos oldatba csak olyan bázis kerül, illetve e bázis reakciójaként csak olyan enolátion létezhet majd, melynek minden egyes molekulája királis környezetben van, ugyanis a szóban forgó bázisok  $-78^\circ\text{C}$ -on ilyen fázistranszfer katalizátor nélkül nem mennek át toluolos oldatba a szilárd fázisból (8. ábra).

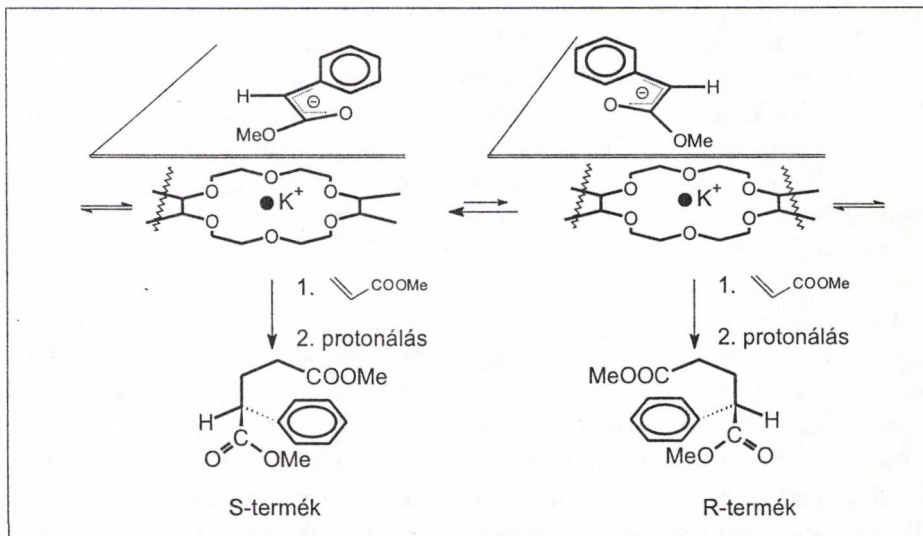




8. ábra. Királis koronavegyületek működése fázistranszfer katalízisben

A 9. ábra a metil-fenilacetát-metil-akrilát-reakció körülményeit és eredményét mutatja be a  $C_2$ -szimmetriát mutató fej-láb szerkezetű bisz-glüko-koronákat használva katalizátorként.<sup>3</sup> Mint látható, az ee. az S-antipódra bizonyos feltételek mellett eléri a 85%-ot, s ez jobb, mint amit eddig az irodalomban leírtak hasonló reakciókra.

Ami a reakció sztereokémiai lefutásának magyarázatát illeti, feltételezhetjük, hogy az enolát-fémion-koronaéter ionpárkomplekek között egyensúly áll



9. ábra. Metil-fenil-acetát reakciója metil-akriláttal KOtBu (30 mol%) és 1d katalizátor (6 mol%) jelenlétében

fönn. Ebben az egyensúlyban a Z-enolát ábrázolt módon történő jobb illeszkedése miatt (azaz mikor az enolát Si-oldala van „felül”, s támadható akriláttal), ez az ionpár dominál, s az akriláttal történő gyors és irreverzibilis reakció ezt a helyzetet fagyasztja be Si-oldali támadással S-antipódot adva. Az elképzelés helyességét valószínűsíti a számítás is (10. ábra).

### Metodika

#### • 1. Koronaéter (1b) K<sup>+</sup> komplex konformációanalízise

A káliumion megközelíthetősége a makrociklus két oldaláról nem azonos, további számítások csak az anion számára hozzáférhetőbb oldalról.

#### • 2. Koronaéter-K<sup>+</sup>-fenilecetsavészter anion komplex konformációanalízise

Az egyes globális minimumoknak megfelelő Si- és Re-oldali komplexek energiakülönbsége: 5,2 kJ/mol

Mért szelektivitás: 76,4% (S)

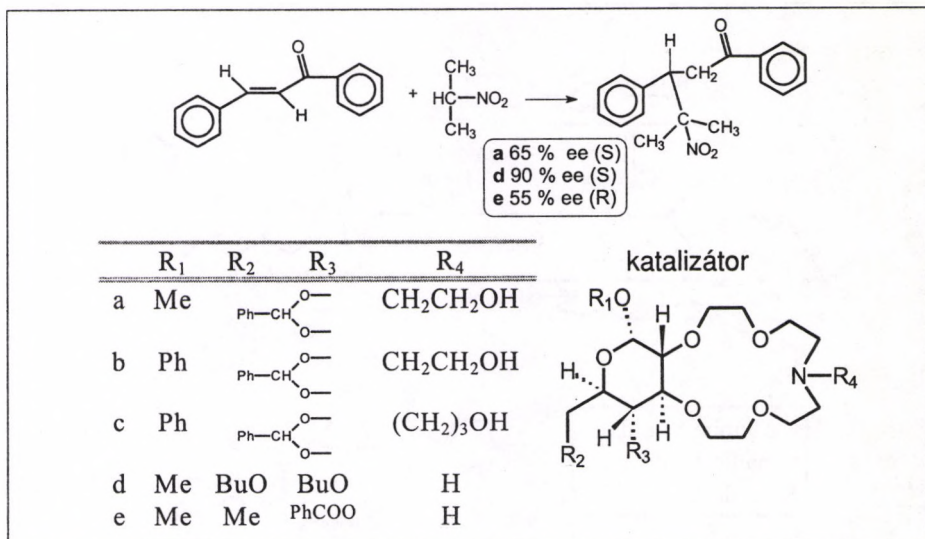
Számított szelektivitás: 78,0% (S)

### 10. ábra

Ez tetrametil-korona-származékra elvégezve azt mutatja, hogy legkisebb energiája annak az elrendezésnek van, amelyről az imént beszéltem, míg a Z-enolátnak Re-oldali támadást és R-terméket eredményező illeszkedése 5,2 kJ/mol-lal nagyobb energiájú képződményt ad. Mindebből az adódik, hogy az S-antipód képződik 78%-ban, jó egyezésben a kísérletben talált 76,5%-os értékkel. (Csak érdekességként mondom el, hogy a számítás szerint a K<sup>(+)</sup>-ion nem a gyűrű képzeletbeli síkjában helyezkedik el, hanem a gyűrű síkja felett, mert ennek az elrendeződésnek itt van energiaminimuma!)<sup>3</sup> Az eredményt azonban az ionpár-aggregáció és a solvatáció különbözőségére visszavezethetően a katalizátor minősége, az oldószer és a hőmérséklet drámaian módosíthatja (11. ábra).

Pl. a kalkon és a 2-nitropropán reakcióját<sup>4</sup> a már megismert C<sub>2</sub>-szimmetriájú koronák jelenlétében, ugyancsak szilárd-folyadék fázistranszfer körülmények között lefolytatva, az R-konfigurációjú addukt képződik 28% feleslegben, míg a fenti aza-lariát-éter használata esetén az irány megfordul, és 65%-ban az S-konfigurációjú termék keletkezik. Az S-konfigurációjú termék feleslege pedig egyenesen 90%-ra nő, ha az aza-koronák nitrogénje szekunder állapotú, és a védőcsoport a 4-es és 6-os hidroxilokon benzál helyett butil. Már-már arra gondolhatnánk, hogy ezzel megtaláltuk az ideális katalizátort, s ezen az úton továbbhaladhatunk a tökéletes felé, de örömről lehűtötte az a

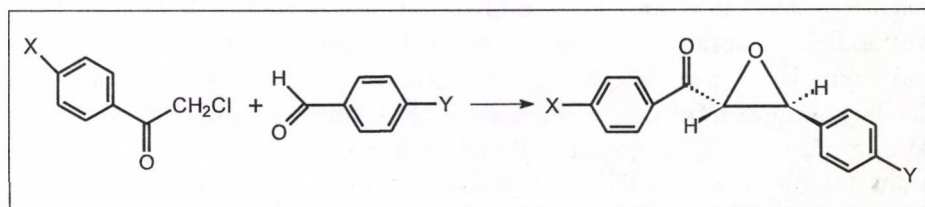




11. ábra. Nitropropán addíciója kalkonra

kísérlet, melyben a 6-dezoxi-6-metil-4-benzoil származékot használva katalizátorként, a reakció ismét irányt vált: most R-konfigurációjú termék képződik 55% feleslegben.

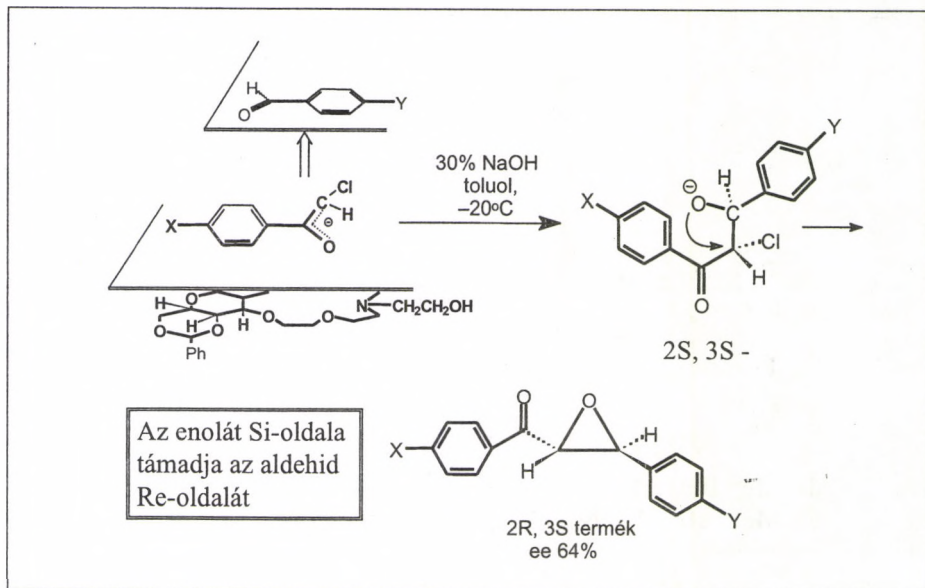
Még érdekesebb ebből a szempontból a másik fontos szén–szén képződési reakcióban, a Darzens-kondenzációban összegyűlt tapasztalatunk (12. ábra).<sup>5</sup>



12. ábra. Darzens-reakció

E reakcióban  $\alpha$ -halogénezett oxo-vegyületeket bázis jelenlétében aromás aldehidekkel hoznak össze, amikor is epoxid keletkezik általában jó termeléssel. Ily módon nyerhető pl. a Ca-csatorna-blokkoló szívgyógyszernek, a diltiazemnek egyik fontos építőköve is.

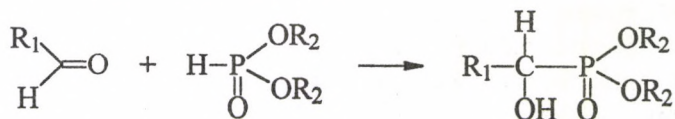
A fenacilkloridnak benzaldehiddel való reakciójában (13. ábra) bázisként szilárd KOTBu-ot használtunk és a  $-78^\circ\text{C}$ -os toluolos oldathoz C<sub>2</sub>-szimmetriájú „Bu-koronát” adtunk, azaz ugyanazt a katalizátort, melyet a Michael-adícióban az imént sikeresen használtunk. Az eredmény nem volt túl lelkesítő,



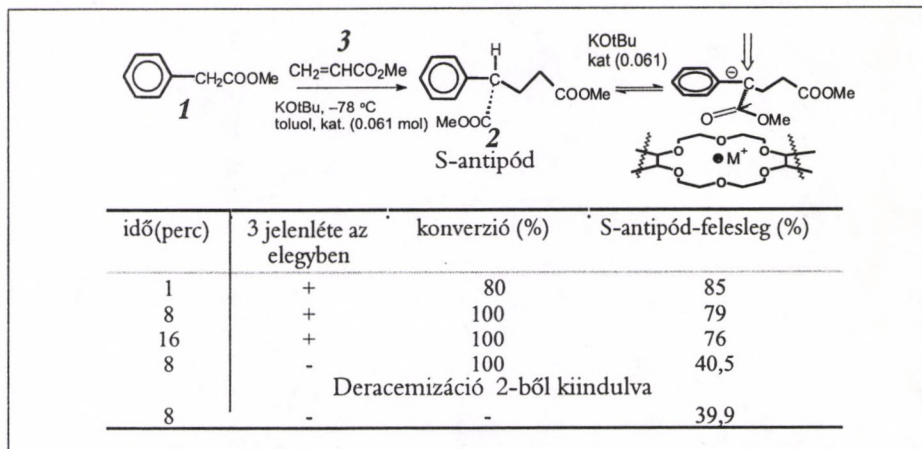
13. ábra. Darzens-reakció királis koronakatalizátor jelenlétében

csak 5%-nyi feleslegben képződött a 2R,3S-antipód. Még ennél is gyengébb eredményt kapunk folyadék-folyadék fázistranszfer körülmények között, vizes 30%-os NaOH-ot használva bázisként, -20 °C-on. Amikor azonban ilyen kísérleti feltételek között a fenti lariat-étereket tettük a reakcióelegybe katalizátorként, az aszimmetriás indukció 64%-ra, ill. 74%-ra ugrott, a 2R,3S-antipódból. Az ábra a reakció egy lehetséges lefutását mutatja; s eszerint a reakció sztereokémiája az első, sebesség-meghatározó lépésben dől el s alakul ki a 2S,3S konfigurációjú intermedier, mert azt követően a 2-es helyzetű atom konfigurációja az  $S_N^i$  folyamat által meghatározott, és 2R-ré változik. A fázis-transzfer folyamatok váltása szilárd-folyadékról folyadék-folyadékra egyébként egy új, még kiaknázandó fogásnak tűnik az aszimmetriás reakciók eredményének befolyásolására.

Sikeres kísérleteket folytatunk királis  $\alpha$ -hidroxi-foszonsavészterek előállítására is. A reakcióban oxo-vegyületekhez dialkilfoszfitokat adunk királis,  $C_2$ -szimmetriájú koronakatalizátorok jelenlétében; a termékben 40%-os fölöslegben keletkezik a balra forgó enantiomer:







14. ábra. Az antipódfelesleg függése az időtől, deracemizáció

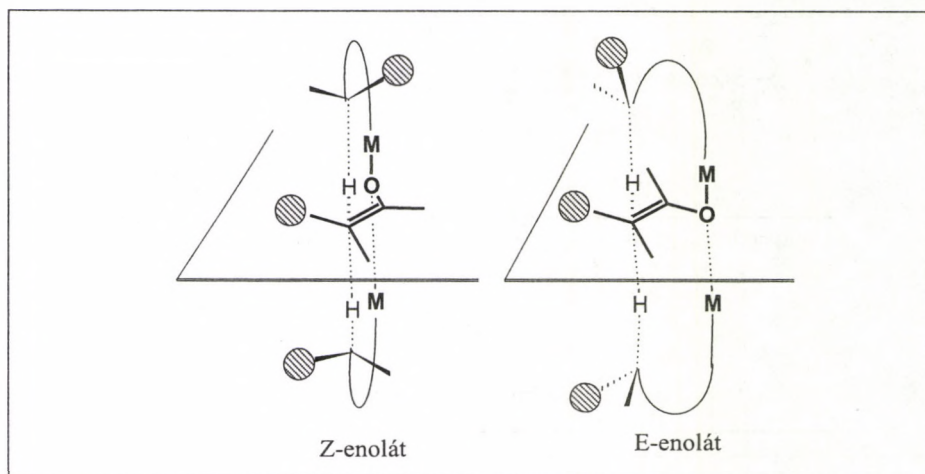
Végezetül néhány szót az aszimmetrikus CH-kötés kialakításáról enolátok enantioszelektív protonálásával, azaz a deracemizációról.<sup>6</sup>

Ezzel a területtel úgy kerültünk kapcsolatba, hogy észrevettük, a metil-fenil-acetát etilakrilát reakciótermékének ee.-százaléka időfüggő (14. ábra).<sup>3</sup>

A reakció egy perc alatt, -78 °C-on már 80%-ban lejártszódik, az így kapott termékben az S-antipód 85% feleslegben van. A reakció 8 perc után teljes ugyan, de az ee. 80%-ra esik vissza, sőt újabb 8 perc után tovább csökken 74%-ra, míg végül a csökkenés 40% ee.-nél csaknem megáll. Ebből a kísérletsorozatból az a következtetés vonható le, hogy az ee. értékét a reakcióban két faktor alakítja; az aszimmetrikus C-C-képződés elsődleges eredményét egy újabb folyamat, a végtermék deprotonációja a komplex ionpár által és az így keletkező, de aszimmetrikus környezetben lévő anion újraprotonálása folyamatosan modifikálja.

Látható, hogy ez utóbbi reakció helyzete az alkalmazott körülmények között 40% ee. az S-antipódra. Ebből az következik, s ezt a kísérlet igazolja is, hogy a termék racemátjából kiindulva, katalitikus mennyiségű királis korona és KOTBu jelenlétében, -78 °C-on S-antipódot készíthetünk. S valóban, 8 perc után az elegyből preparált termékben 40%-nyi mennyiségben megtalálható az S-antipód. Más szóval a racemátot részben deracemizáltuk!

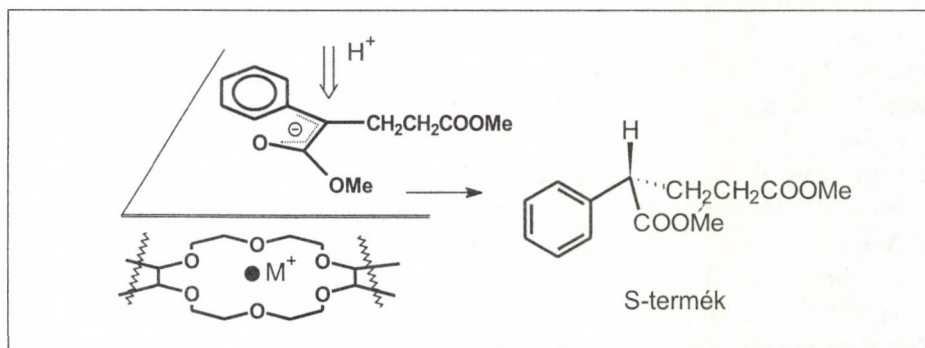
A deracemizáció a szintetikus kémia igen értékes, fiatal területe. Arról van itt szó, hogy a királis C-atomról a hidrogént egy ekvivalens bázissal lehetőség szerint irreverzibilis módon eltávolítják, s az így keletkező, legtöbbször enolát típusú ambidens anionnak ismét protont kínálnak fel (15. ábra). Ha ez a proton királis környezetben van (pl. királis fenol vagy királis amin a protonforrás),



15. ábra. Lehetséges átmeneti állapotok enolátok protonálásában  
kiralis protonforrás jelenlétében

akkor a két antipód eltérő sebességgel képződik, s így az egyik, a kívánt antipód feleslegben lesz. Ennek mértéke néha elérheti a 99%-ot is, azaz a recemát gyakorlatilag egész mennyisége átalakul egyik antipóddá, a kívánttá részolválás nélkül, s így nem 50, hanem elvileg 100%-os termelést érhetünk el.

A folyamat egyébként a kísérleti feltételekre igen érzékeny, sokat kell általában a jó termelésért dolgozni, hiszen a protonálásnak egyfelől az ambidens ion *szenén* kell történnie, másfelől azt is el kell érni, hogy az enolát a protonálás előtt célszerűen csak egyik, a kedvező geometriai izomer formában „exisztáljon”, mert a másik geometriai izomer, amint a 15. ábrából látható, másfajta R/S arányt ad.

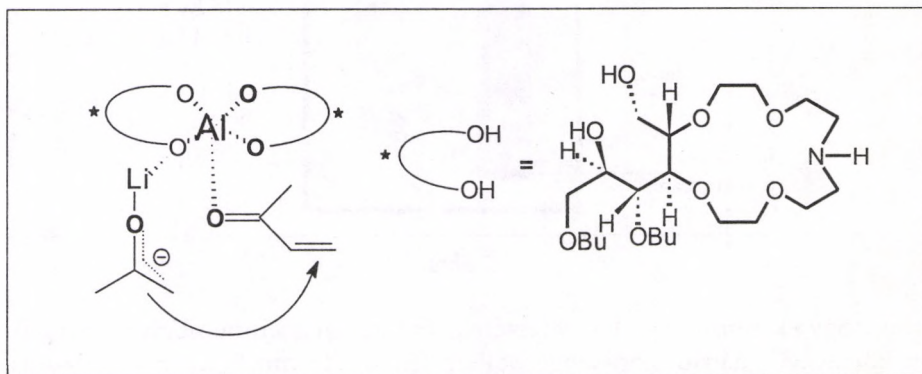


16. ábra. C-H-kötés képződése, deracemizáció



A mi módszerünk (16. ábra) elviekben is új; itt ugyanis nem ekvivalens, hanem csak katalitikus mennyiségű bázis és katalitikus mennyiségű királis koronavegyület kell, továbbá nálunk nem a protonforrás, hanem az anion van királis környezetben. A kísérleteket folytatjuk, és eredményeinkről folyamatosan beszámolunk.

Végül megemlítem, hogy folyamatban van egy igen érdekes és reménykeltő kísérletsorozatunk is, melynek jelen pillanatban csak a királis-korona katalizátor-„kellékét” írom le (17. ábra).

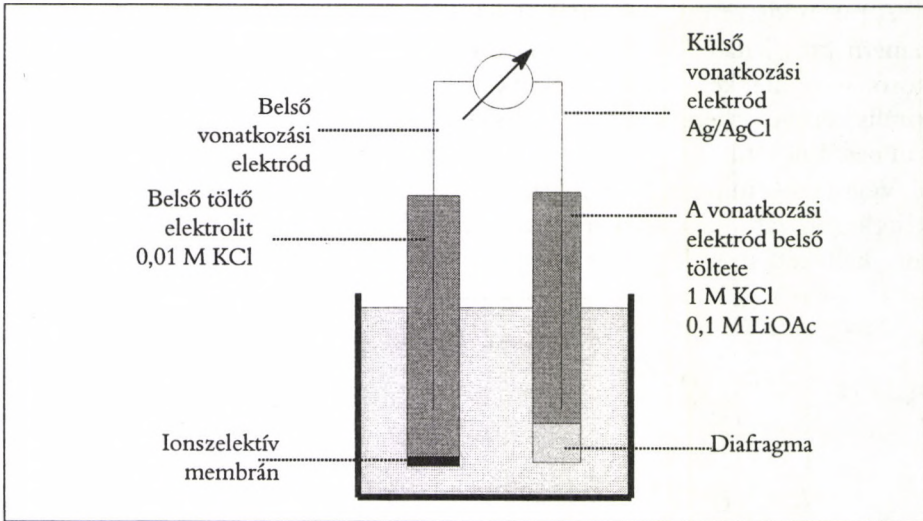


17. ábra. Tervek: enzimek utánzása

Ettől a vegyülettől azt várjuk,<sup>7</sup> hogy megfelelő fémkomplexei pl. alumíniummal és lítiummal a reagáló partnereket, pl. az enont és az enolátot megfelelő térhelyzetbe „rögzítik”, s ezáltal a reakció átmeneti állapotának mind az energia-, mind pedig az „entrópia-igényét” – akárcsak ahogy ez az enzimreakcióknál is történik – lecsökkentik.

## II. Koronaéterek ionszelektív membránelektrodokban

Az élő szervezetekben található fémeket két nagy csoportra oszthatjuk; a nagy tömegben, mintegy 1%-ban jelen lévő fémekére, mint amilyen a nátrium, kálium, kalcium és magnézium, és a 0,01%-ban előforduló nyomelemekére, melyekhez mindenekelőtt a vas (5 g van egy 70 kg-os szervezetben) említendő meg, de idetartozik a mangán, a kobalt, a cink is. Az ismeretes volt régen is, hogy a kálium és a nátrium, ill. ezek aránya életfontosságú a szervezet vízháztartása, az ingerületvezetés, a neuromuszkuláris és az enzimaktivitás fenntartása szempontjából, de paradox módon a ritka elemekétől eltérően komplexeikről, hatásmechanizmusukról a legújabb időkig keveset tudtunk. Ez azonban nem csoda, hiszen olyan kérdésekre kellett többek között választ



18. ábra

adni, hogy a káliumion szelektív felvételét és leadását a sejtmembránon át a sejtet körülvevő „nátriumion-tengerből” miféle diszkriminációs mechanizmus teszi lehetővé.

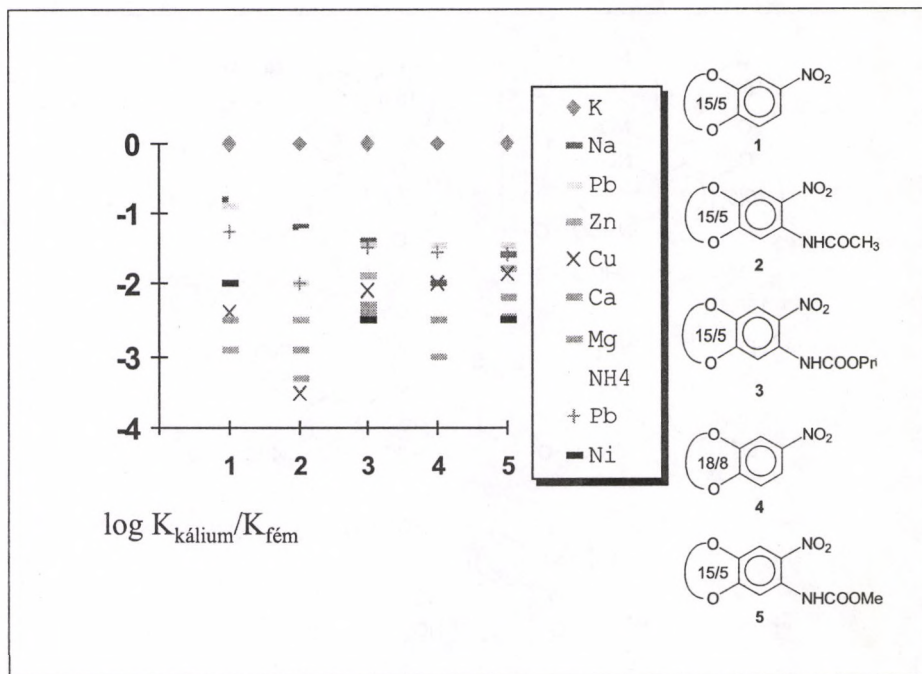
A válasz mai szintű megfogalmazásában s a fémionok koncentrációjával összefüggő betegségek felderítésében az ionszelektív membránelektrodok (18. ábra) megjelenésének igen nagy szerepe volt és van, és ma már akár egyetlen sejt ionkoncentrációja is nagy pontossággal meghatározható. Az ilyen elektrodok kutatásának nemzetközileg és világszerte ismert és elismert úttörője, Pungor Ernő akadémikus, és csoportjának vezetője, Tóth Klára akadémikus azzal a megtisztelő kéréssel fordult hozzánk, hogy dolgozzunk együtt, és szintetizáljunk olyan koronavegyületeket, melyek membránelektrodokba beépítve alkalmasak lesznek ionok koncentrációjának mérésére. Először a létfontosságú  $K^{(+)}$ -ion került sorra, s ez volt egyúttal a legnagyobb kihívás is, mert

1. ionszelektív elektrodok koronaalapú ligandumokkal eladdig még sehol a világon nem készültek, s ráadásul

2. a szintetizált elektrod  $K^{(+)}$  szelektivitásának  $Na^{(+)}$ -ionnal szemben olyan-nak kellett lennie, hogy – közérthetően fogalmazva – 10 000  $Na^{(+)}$ -ionra egy  $K^{(+)}$ -ion tartalmazó oldatból ezt az egy  $K^{(+)}$ -iont kellett felismernie s vele komplexet képeznie;

3. a nehézséget még csak fokozta, hogy az oldatban mért szelektivitási állandók nem adnak kellő eligazítást a szilárd hordozóba épített korona-ligandum viselkedéséről.



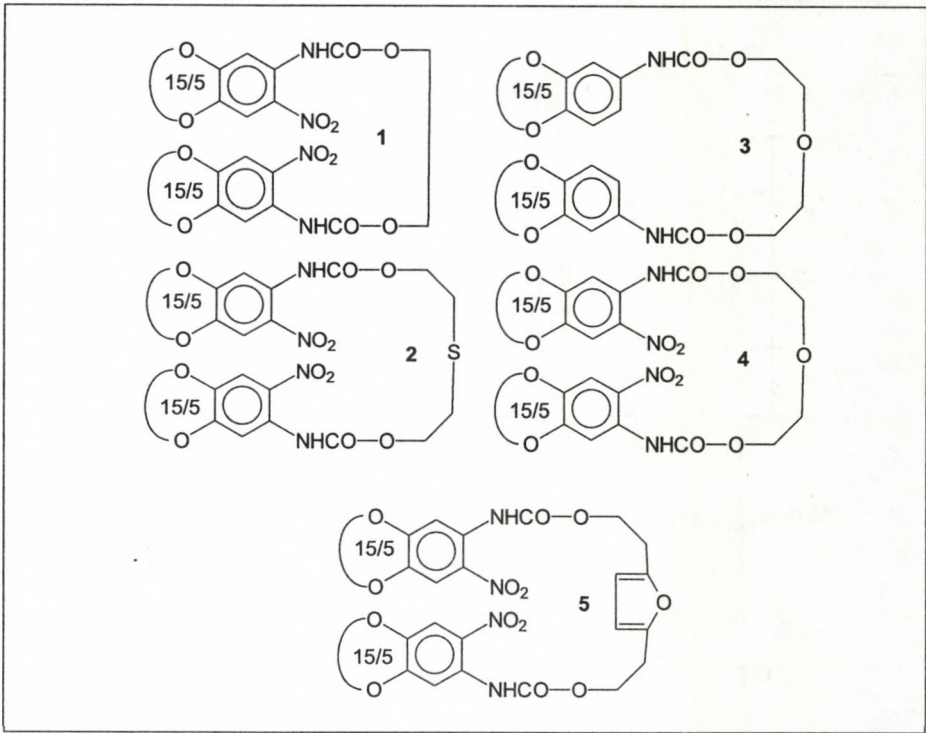


19. ábra

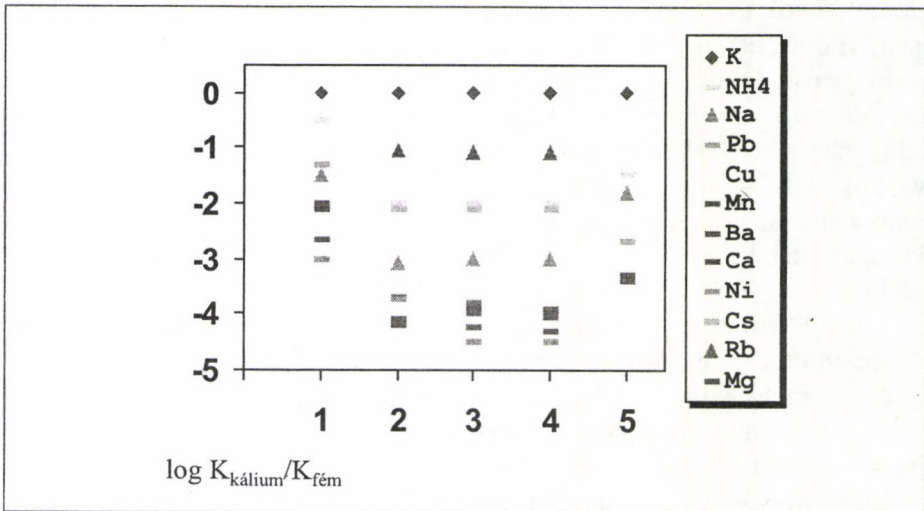
További kívánság az volt, hogy az elektród biológiai rendszerben is működjék, és ott stabilis legyen hosszú időn át. A munkához az olcsón, jó termeléssel hozzáférhető és könnyen funkcionálizálható benzo-15-korona-5-ből (19. ábra) indultunk ki.<sup>8</sup>

Elektroanalitikai szempontból a nitrozármazékok voltak a legígéretesebbek, de még nem igazán jók. Hogy megnöveljük a K<sup>(+)</sup>-ionnal szembeni szelektivitást, a két 15-korona-5 egységet összeköttöttük egy láncsal, arra gondolva, hogy a K<sup>(+)</sup>-ion a gyűrűbe nem fér ugyan be, de így intramolekuláris 2:1 sandwich-típusú komplexet képezhet vele, amíg a Na<sup>(+)</sup>-ionokkal szembeni komplex stabilitási állandó nem változik, sőt az NO<sub>2</sub> jelenléte miatt az még csökken is a gyűrűkben (20. ábra).

A gondolatmenet jónak bizonyult (21. ábra), és sikerült elektroanalitikai szempontok által megkívánt további módosításokkal olyan elektródokat kifejleszteni, melyeknek tulajdonságai az akkor ismert és legjobbnak tartott valinomicin alapú elektródét is meghaladják; K<sup>(+)</sup> szelektivitásuk kiváló, és biológiai rendszerekben (vér, vizelet) még egy év után is stabilisak. A munkából szabadalom is készült, azt a japán Horiba cég megvásárolta, és az elektródot a mai napig is forgalmazza világszerte.



20. ábra



21. ábra



a  $R_1 = H$   $R_2 = C_{16}H_{33}$   
b  $R_1 = R_2 = Et$   
c  $R_1 = R_2 = Bu$   
d  $R_1 = Me$ ,  $R_2 = C_{12}H_{25}$

Ionok	$K_{ij}^{pot}$	
	d	valinomicin
<i>Rb</i>	-0,86	+0,43
<i>Cs</i>	-2,46	-0,38
<i>NH<sub>4</sub></i>	-2,15	-1,83
<i>Na</i>	-3,60	-4,04
<i>Ca</i>	-6,13	-5,06
<i>Mg</i>	-4,93	-4,92

22. ábra

A 22. ábra e vegyületek képleteit és szelektivitási adatait mutatja a valinomicinével összehasonlítva.

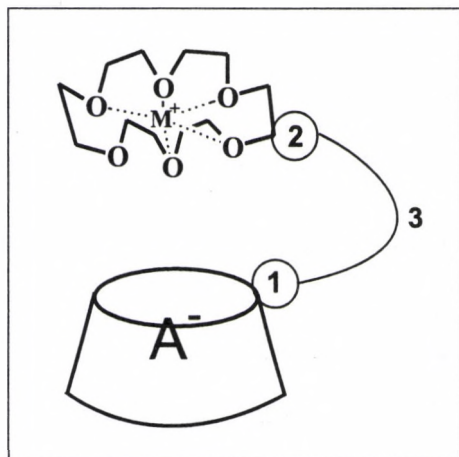
A munka a mai napig is folyik, és a  $K^{(+)}$ -ion elektród-ligandumján kívül  $Ca^{(2+)}$ ,  $Zn^{(2+)}$ ,  $Cs^{(+)}$  szelektív elektródok ligandumjai is elkészültek hasonló együttműködéssel.

### III. Só jellegű farmakonok tökéletes molekuláris csomagolása<sup>9</sup>

A koronavegyületek gyógyászati felhasználását keresve, kutatócsoportunk egyebek között só jellegű farmakonok farmakokinetikai tulajdonságainak befolyásolását tűzte ki célul, egy elviekben is új megközelítési módot használva.

Az elgondolás az volt, hogy a só kationját koronaéter típusú anyaggal komplexáltatjuk, az aniont pedig ugyanezen koronához kovalensen kapcsolt ciklodextrin-egységgel „fogjuk meg”, tehát a só egészének „molekuláris csomagolását” valósítjuk meg (23. ábra).

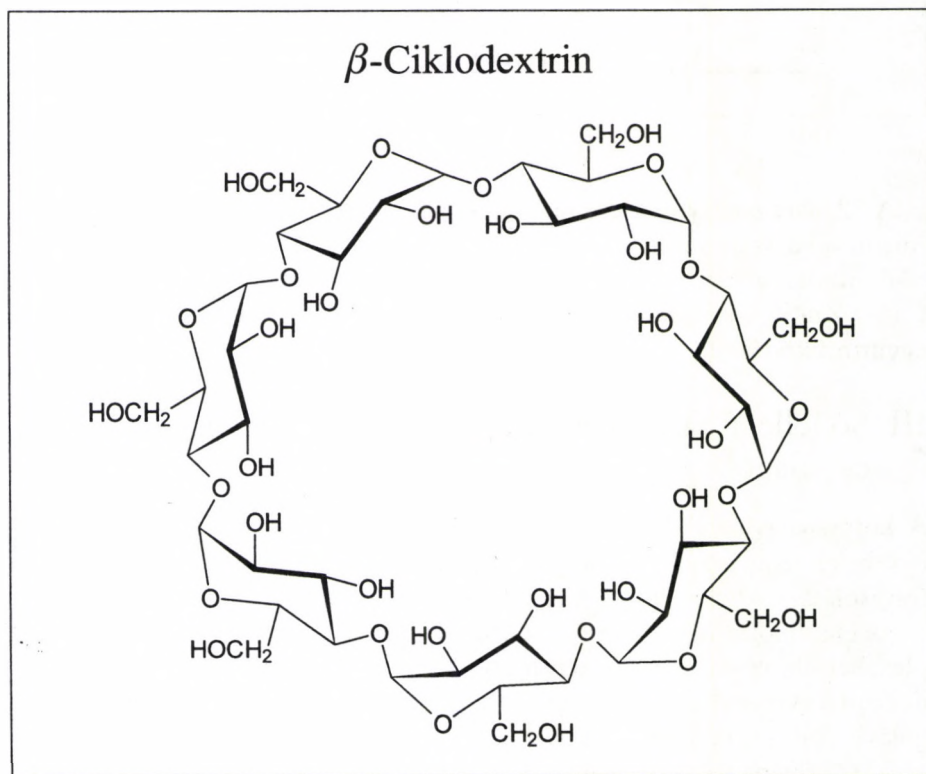
A 23. ábrán látható „fazék” a hét glükózbegységéből álló makrogyűrűs  $\beta$ -ciklodextrint jelképezi (24. ábra).



23. ábra

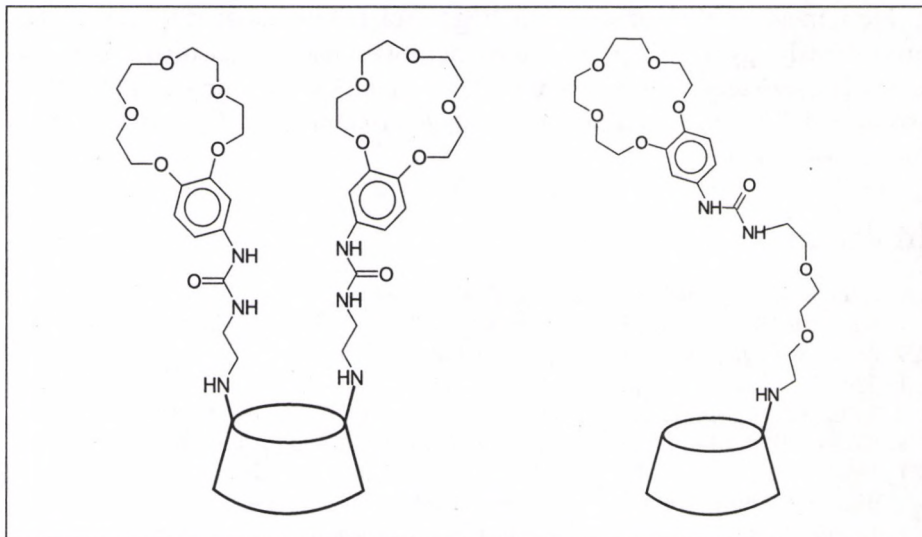
A feladat megoldásához kapcsolásra alkalmas koronaétereket kellett szintetizálnunk, a  $\beta$ -ciklodextrint is elő kellett erre készítenünk, s végül kapcsolatot kellett létrehoznunk a két molekularész között (25. ábra).

A részletek mellőzésével, mind-egyik részfeladatot megoldottuk, és a komponensek összekapcsolásával több célmolekulát is szintetizáltunk. NMR, ORD és ionszelektív elektródok felhasználásával kimutattuk, hogy molekulánk valóban „tudja” azt, amit vártunk tőle; az új egység csak igen gyengén oldódik vízben, de



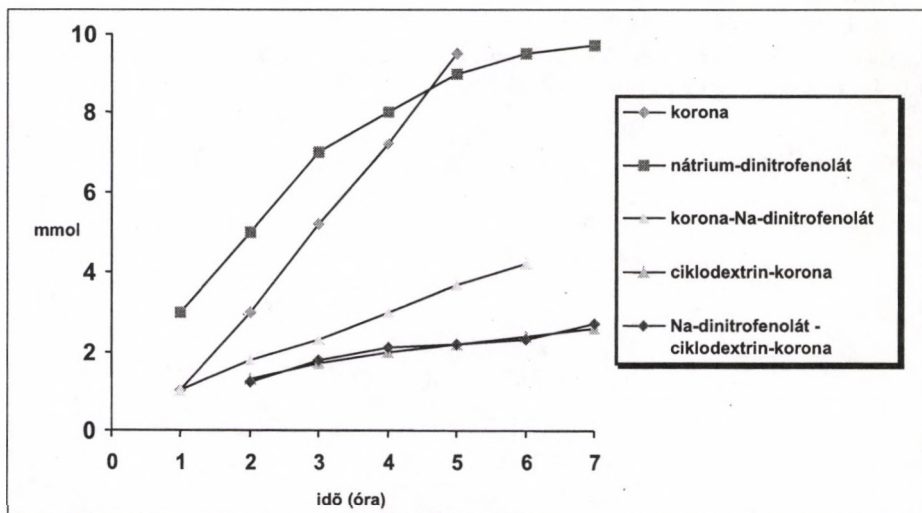
24. ábra





25. ábra

oldódik lipofil oldószerekben, Na-p-nitrofenolát-sóval komplexet képez, oly módon, hogy az anion a ciklodextrin üregébe nyomul be, a kationt pedig a korona tartja fogva, s ennek megfelelően a komplex stabilitási állandója megnő a két kapcsoló komponens, a ciklodextrin és a koronavegyület fizikai keverékéhez képest.



26. ábra

Nem meglepő ezek után az sem, hogy a sók felszívódását az új molekulatípus retardálja; gyomorfalat modellező membránon a só saját áthaladási sebességével egyező sebességgel engedi át (26. ábra). Hogy az ilyenfajta „molekuláris csomagolás” alkalmazásra talál-e a gyógyszer technológia fegyvertárában, az még a jövő zenéje.

## Irodalom

1. a) Lehn, J.-M.: *Supramolecular Chemistry*, VCH: Weinheim, 1995.  
b) Chapman, R. G., Sherman, I. C.: *Tetrahedron*, 1997. 53. 15911–15945.
2. a) Pedersen, C. J.: *J. Am. Chem. Soc.*, 1967. 89. 7017–7036.  
b) Tőke L.: *Természet világa*, 1988. 119. 59–63.
3. Tőke L., Bakó P., Keserű Gy. M., Albert M., Fenichel L.: *Tetrahedron*, 1998. 54. 213–222.
4. a) Bakó P., Tőke L., Szöllősy Á., Bombitz P.: *Heteroatom Chemistry*, 1997. 8. 333–337.  
b) Bakó P., Kiss. T., Tőke L.: *Tetrahedron Letters*, 1997. 38. 7259–7262.
5. a) Bakó P., Szöllősy Á., Bombitz P., Tőke L.: *Synlett*, 1977. 291–292.  
b) Bakó P., Vizvárdi K., Bajor Z., Tőke L.: *Chem. Commun*, 1998. 1193–1194.
6. a) Fehr, C.: *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 1996. 35. 2566–2587.  
b) Krause, N., Ebert, S., Haubrich, A.: *Liebigs Ann. Recueil*, 1997. 2409–2418.
7. Shibasaki, M., Sasai, H., Arai, T.: *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 1997. 36. 1236–1256.
8. a) Tőke L., Bitter I., Ágai B., Csongor É., Tóth K., Lindner E., Horváth M., Hartfouch S., Pungor E.: *Liebigs Ann. Chem.*, 1988. 349–353.  
b) *ibid*, *Liebigs Ann. Chem.*, 1988. 549–554.  
c) *ibid*, *Liebigs Ann. Chem.*, 1988. 761–763.  
d) *ibid*, *Analytical Letters*, 1989. 22. 1185–1207.  
e) *ibid*, *Analytical Letters*, 1992. 25. 453–470.  
f) *ibid*, *Electroanalysis*, 1993. 5. 781–790.
9. Ágai B., Fenichel L., Bakó P., Tőke L., Szenté L., Szejtli J.: in *Proc. Int. Symp. Cyclodextrins*, 4th. (Eds.: Huber, J., Szejtli J.) Kluwer, Dordrecht, 1988. 113–117.



Farkas Tibor

az MTA rendes tagja

# MEMBRÁNFOSZFOLIPIDEK MOLEKULÁRIS ÖSSZETÉTELE ÉS A TESTHŐMÉRSÉKLET

Elhangzott 1998. október 20-án

A biológiai folyamatok jelentős hányada valamilyen felületen játszódik le, mely felületek egyik fontos építőelemei a foszfolipidek. A biomembránok lipidtartalma 15–40% között változhat. A Singer–Nicholson-membránmodell szerint (*Singer és Nicholson, 1972*) a fehérjék lipidek „tengerébe” vannak beágyazva, és értelemszerűen ezen fehérjék funkciói, enzimek aktivitásviszonyai vagy a membránok permeabilitása a környező lipidmolekulák milyenségének, ill. mozgásviszonyainak is függvényei. E szerkezetek lipidösszetételét számos külső és belső tényező módosíthatja, pl. bioszintetikus folyamatok vagy a táplálékkal felvett zsírsavak. A sejtek egyik alapvető törekvése az, hogy membránjaiknak szerkezeti és funkcionális integritását fenntartsák, pl. oly módon, hogy membránlipidjeik összetételét úgy módosítják, hogy az az adott körülmények között optimális működést tegyen lehetővé.

A Singer–Nicholson-membránmodellből az is következik, hogy a membránok egy ún. „liquid-kristályos” állapotban vannak a test hőmérsékletén, és ezért a sejteknek konstans fluiditási állapotot kell fenntartaniuk változó környezeti körülmények között. A környezet hőmérséklete az egyik legfontosabb tényező, mely a hideg vérű szervezetek aktivitását, szezonális előfordulását és

geográfiai elterjedését befolyásolja. Ezeknek a szervezeteknek haladéktalanul válaszolniuk kell a környezet hőmérsékletének változásaira, hacsak nem találtak valami más módot, pl. inaktív állapot, téli álom stb., ilyen hatások kivédésére. A válasz pedig a legtöbb esetben a membránalkotó lipidmolekulák megfelelő átstrukturálása. Egy ilyen átrendezés egy csomó folyamat megszervezését kívánja meg a sejtektől, mint pl. megfelelt lipidek/zsírsavak „legyártása”, azoknak a már meglevő foszfolipid-molekulákba való beépítése vagy a foszfolipid-fejcsoportok arányainak megváltoztatása.

## A membránok homeoviszkozus adaptációja

Herodek Sándor kollégámmal talán mi voltunk az elsők (Farkas és Herodek, 1964), akik kimutatták, hogy egyes vízi szervezetek lipidjeik összetételét és olvadáspontját úgy képesek módosítani, hogy pl. az olvadáspont mindig néhány °C-kal alatta legyen a környezet hőmérsékletének. Ezen eredmények közlése után kb. 15 évvel dr. Sinensky végzett kísérleteket *E. colival*, s a sejteket különböző hőmérsékleteken tenyésztette, és azt a megállapítást tette, hogy a sejtekből kinyert foszfolipidek thermotrop fázisváltozási hőmérséklete (ahol a rendszer egy merev, gélszerű állapotba megy át) pontosan követte a tenyésztési hőmérsékletet, vagyis: az minél alacsonyabb volt, a fázisátmenet is annál alacsonyabb hőmérsékleten történt, de a tenyésztés hőmérsékletén mért mikroviszkózítások azonosak maradtak. Ezt ő „homeoviszkozus adaptáció”-nak nevezte el (Sinensky, 1974). Az *E. coli* zsírsavösszetétele igen egyszerű, foszfolipidjeit csupán néhány telített és kizárólag egyszer telítetlen zsírsav építi fel. A prokariótákkal szemben a legtöbb soksejtű változó hőmérsékletű és meleg vérű eukarióta szervezet foszfolipidjei sokkal bonyolultabb felépítésűek, azokban általában 10-20-féle különböző zsírsav fordul elő, melyeknek telítetlenségi foka 0 és 6 kettős kötés között, lánchosszuk pedig 14 és 22 szénatom között változhat. Ha figyelembe vesszük, hogy egy foszfolipid-molekulát csak 2 zsírsav észterezhet, akkor csupán egyfajta foszfolipidből  $2^{10-20}$ -félével kell manipulálniuk ezen szervezetek sejtjeinek, de a képlet tovább komplikálódik akkor, ha azt is meggondoljuk, hogy a membránokban 5-8 különböző fejcsoportú foszfolipid fordul elő. A legfontosabb környezeti tényező, mellyel bármilyen változó testhőmérsékletű szervezet szembe találja magát, a környezet hőmérséklete, mely változhat napszakosan, évszakosan, a mély vízi tavakban/tengerekben vertikálisan vagy éppen kiszámíthatatlanul. A hőmérsékletet úgy is tekinthetjük, mint egy membránperturbánst, a membránokat pedig mint valamilyenfajta szenzorokat, melyek foszfolipidjeik, ill. zsírsavaik révén azonnal jelzik a környezet hőmérsékletében beállott változásokat.



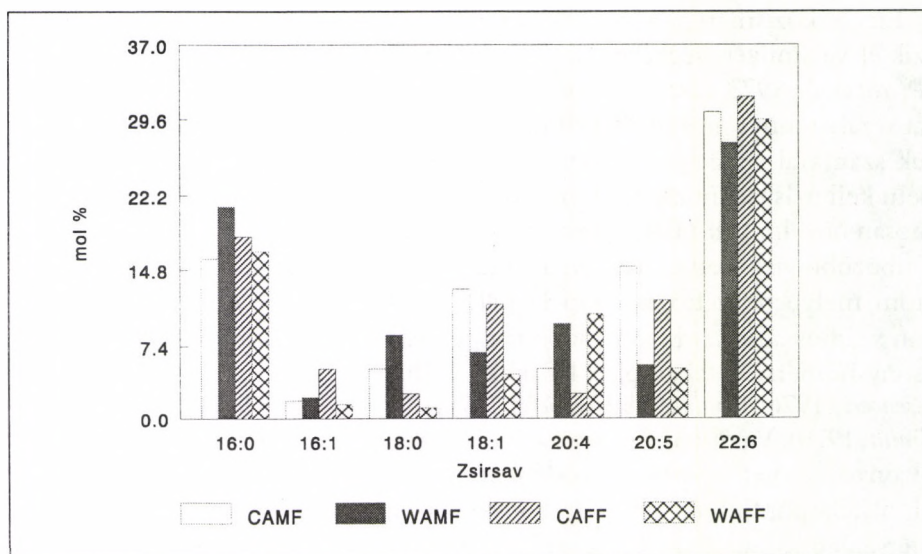
Elégge közismert az a tény, hogy minél alacsonyabb hőmérsékleten növekszik/él valamilyen szervezet, annál telítetlenebbek a lipidjei, és megfordítva (Precht et al., 1973; Hazel és Prosser, 1974). A zsírsavak membránfluidizáló hatását azzal a ténnyel hozták összefüggésbe, hogy olvadáspontjuk a telítetlen kötések számával szinte lineárisan csökken. Így a poikilotherm szervezeteknek nem kell mást tenniük, mint pl. a külső hőmérséklet csökkenésével párhuzamosan növelni kell a foszfolipidjeikben a telítetlen zsírsavak arányát. A legkülönbözőbb vízi szervezetekben a legtelítetlenebb zsírsav lánchossza 22 szénatom, melyben 6 kettős kötés foglal helyet (dokozahexaensav, [22:6 $\omega$ 3]). Valóban számos adat azt bizonyítja, hogy pl. kísérletes körülmények között, alacsony hőmérsékleteken pl. a halakban e zsírsav szintje növekszik (Farkas és Csengeri, 1976; Caldwell és Vernberg, 1970; Knipprath és Mead, 1966; Kemp és Smith, 1970). Valójában azonban a kérdés sokkal bonyolultabb. A foszfolipidek bizonyos, a membránok működése szempontjából fontos paraméterei, mint pl. olvadáspontjuk (vagy a folyékony-kristályos-merev gél fázisátmeneti hőmérsékletük), az általuk a membránokban elfoglalt felületük nem lineáris függvényei az őket észterező zsírsavak telítetlenségi fokának. Kimutatták, hogy mindkét paraméterben akkor következik be a legdrasztikusabb változás, amikor a molekulába az első cisz kettős kötés beépül (Coolebar et al., 1983; Evans et al., 1987), további kettős kötések már csak kismérvű változást eredményeznek, és a 6. kettős kötés beépítésének már alig van jelentősége.

## Foszfolipidek a májban és a testhőmérséklet

Azt, hogy a telítetlen zsírsavak abszolút mennyiségének termoadaptációs szempontból nem sok jelentősége van, úgy bizonyítottuk be, hogy kimutattuk, az evolúciósan alacsony (5–6 °C), ill. magas hőmérsékletekhez adaptálódott tengeri vagy édesvízi halak foszfolipidjeiben a [22:6 $\omega$ 3] szintje közel azonos volt. Viszont jellegzetes különbségek adódtak az olajsav szintjében, mely mindkét hideghez adaptálódott csoportban sokkal magasabb volt, mint a meleghez adaptált társaikban (1. ábra).

Ez különösen az egyik foszfolipid, a foszfatidiletanolamin tekintetében volt különösen kirívó, és nemcsak a halak, hanem pl. garnélarákok esetében is (Dey, et. al., 1987).

Mint említettük, a membránokban számtalan, több száz foszfolipid-féleség, molekulaspecies fordul elő amiatt, hogy egy foszfolipid-molekulában csak két zsírsav helyezhető el, de a jelenlevő zsírsavak száma igen nagy. Ma már adva vannak a technikák, hogy ezeket a molekulaspecieseket legalább nagyjából szétválaszthassuk. Ilyen típusú elemzések azt a meglepő eredményt hozták,



1. ábra. Májfoszfolipidek zsírsavösszetétele.

CAMF: hidegadaptált tengeri hal; CAFF: hidegadaptált édesvízi hal;

WAMF: melegadaptált tengeri hal; WAFF melegadaptált édesvízi hal

hogyan a környezet hőmérsékletének csökkenésével csupán néhány molekula-species aránya növekszik, mégpedig azoké, amelyekben a foszfolipid glicerinvázának sn-1 szénatomjához egy monoén, az sn-2 szénatomjához pedig egy többszörösen telítetlen zsírsav, a legtöbb esetben [22:6 $\omega$ 3] kapcsolódik (Fodor et al., 1995). Ez a tény a legkülönbözőbb összefüggésekben is igaznak tűnik, pl. arktikus tengeri és édesvízi halak mája, agya (Dey et al., 1993; Buda et al., 1994) vagy garnélarákok (Farkas et al., 1994), de még fonalférgek esetében is (Tanaka et al., 1996) (1. táblázat).

1. táblázat

Néhány foszfatidiletanolamin-species meleghez és hideghez adaptált szervezet májában, hepatopankreasában

	MAÉH	HAÉH	MATH	HATH	GARNÉLA <sup>1</sup>	GARNÉLA <sup>2</sup>
18:1/20:5	–	0,9	0,5	3,6	4,8	20,1
18:1/22:6	5,4	10,2	6,5	20,4	7,6	23,2
18:1/20:4	4,8	17,4	–	–	2,7	2,4
16:0/22:6	23,1	15,8	23,3	23,1	13,3	19,5
18:0/22:6	17,0	6,2	7,5	2,5	19,6	1,8

MAÉH: meleghez adaptált édesvízi hal; HAÉH: hideghez adaptált édesvízi hal;

GARNÉLA<sup>1</sup>: származási hely Egyiptom; GARNÉLA<sup>2</sup>: származási hely Norvégia



Nyilvánvalóan ez a molekulaspecies olyan kiváló tulajdonságokkal rendelkezik, melyek alkalmassá teszik a membránok biofizikai paramétereinek hőmérsékletfüggő szabályozására. Pontosabban abban az időben, amikor mi ezeket a megfigyeléseket tettük, egy orosz kutatócsoport a különböző foszfolipid-molekulaspeciesek geometriai viszonyait tanulmányozta. Kimutatták pl., hogy a 18:1/22:6 species sokkal nagyobb térigényű, mint a 18:0/22:6 species (Zabelinskii et al., 1995), sőt még azt is, hogy a [22:6 $\omega$ 3] beépítése a molekulába nemhogy növeli, de csökkenti a molekula térigényét (2. táblázat).

Ezt azzal a ténnyel lehet összefüggésbe hozni, hogy a [22:6 $\omega$ 3] a molekulában egy pálcika alakú konformációt vesz fel (Applegate és Gloomeset, 1991), amely miatt az ilyen foszfolipidek, ill. a belőlük képzett membránok még kontrahálódnak is. A kép tovább bonyolódik akkor, ha figyelembe vesszük, hogy a membránokban egyéb foszfolipidek is vannak, és ezek bonyolult kölcsönhatásokra képesek, így pl. kimutatták, hogy foszfatidiletanolaminok tovább csökkentik a foszfatidilkolin-molekulák által elfoglalt felületet (Garwisch és Holte, 1996). A környezeti hőmérséklet csökkenésével a zsírsavláncok mozgékonyasága csökken, és a membránokban a fokozódó hidrofób kölcsönhatások miatt a foszfolipid-molekulák egyre közelebb kerülnek egymáshoz, más szóval a membránok tömítettsége növekszik. Nyilvánvalóan a foszfatidiletanolamin és a foszfatidilkolin sn-1 helyzetébe beépített egyetlen cisz kettős kötés többek között ennek hat ellenébe.

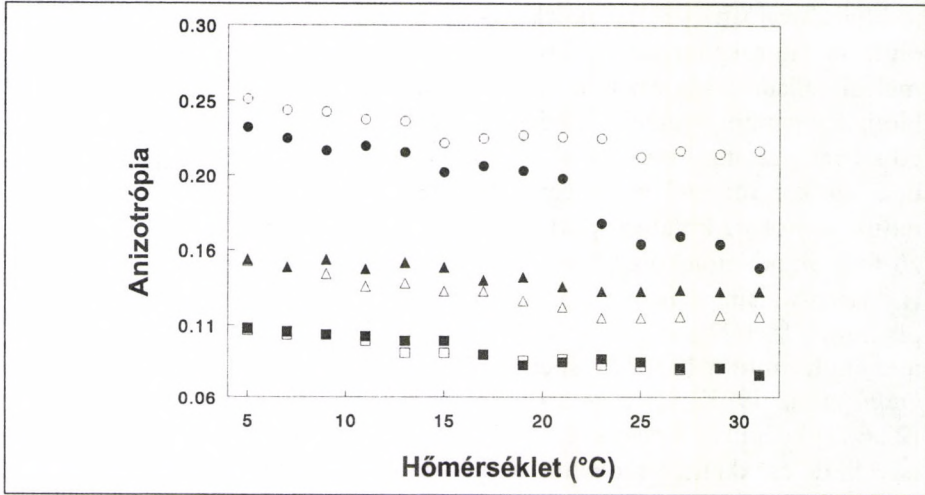
Hideghez (5 °C) és meleghez (22 °C) adaptált édesvízi halak (*C. Carpio*), arktikus (*Ophioidon elongatus*) és szubtrópusi (*Nemipterus hexodon*) eredetű tengeri halak májából (5–6 °C, ill. 25–27 °C) és arktikus (*Pandulus borealis*) és mediterrán (*Parapandulus sp.*) régióból származó dekapoda rákok (2 °C, ill. 22 °C) hepatopankreasából izolált foszfolipid vezikulákon végzett fluiditásmérések eredményei egybeesnek a fenti gondolatmenettel (2., 3. ábra).

Ezeket a méréseket különböző anthroxyloxy zsírsavak segítségével végeztük, melyek ebben az esetben a vezikulák C-2, C-12 és C-16 régiójának rendezettségéről adtak információt. A hidegadaptált állatok membránjainak C-2 régiója minden esetben rendezetlenebbnek bizonyult, mint a meleghez adaptált állatok membránjainak hasonló régiója, és ugyanez igaz a *C. carpio* membránjainak

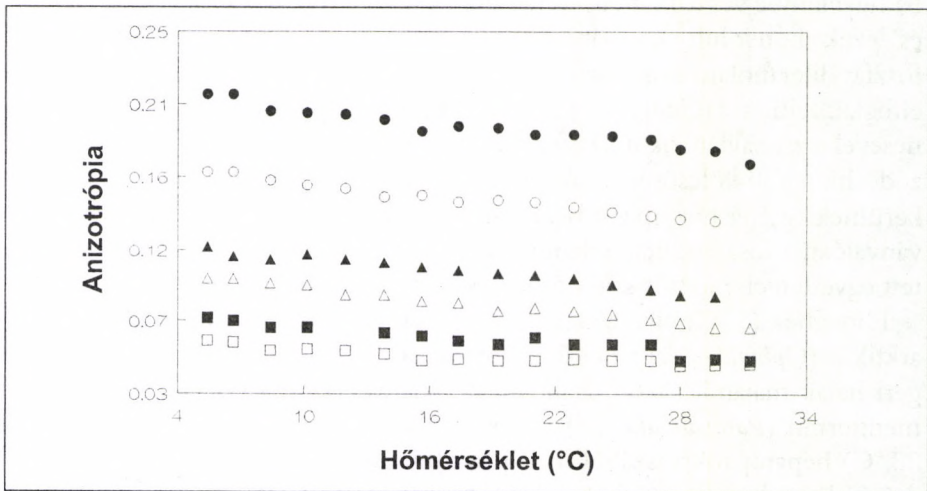
2. táblázat

Különböző foszfolipid-molekulaspeciesek által elfoglalt tér membránsíkjában képzett vetületének nagysága (Zabelinskii et al., 1995 alapján)

	Terület (Å <sup>2</sup> )
16:0/16:0	71,49
18:0/18:0	67,87
18:1 $\omega$ 9/22:6 $\omega$ 3	102,61
18:0/22:6 $\omega$ 3	79,62
18:0/20:4 $\omega$ 3	85,96
16:0/22:6 $\omega$ 3	82,88



2. ábra. 2-, 12(9-anthroyloxy) sztearin (2-, 12-AS) és 16-(9-anthroyloxy) palmitinsav (16-AP) fluoreszcencia-anizotrópiája arktikus és szubtrópusi eredetű halak máj-foszfolipidjeiből készült vezikulákban. Üres szimbólumok: Ophiodon elongatus, zárt szimbólumok: Nemipterus hexodon. ●, ○: 2-AS; ▲, △: 12-AS; ■, □: 16-AP

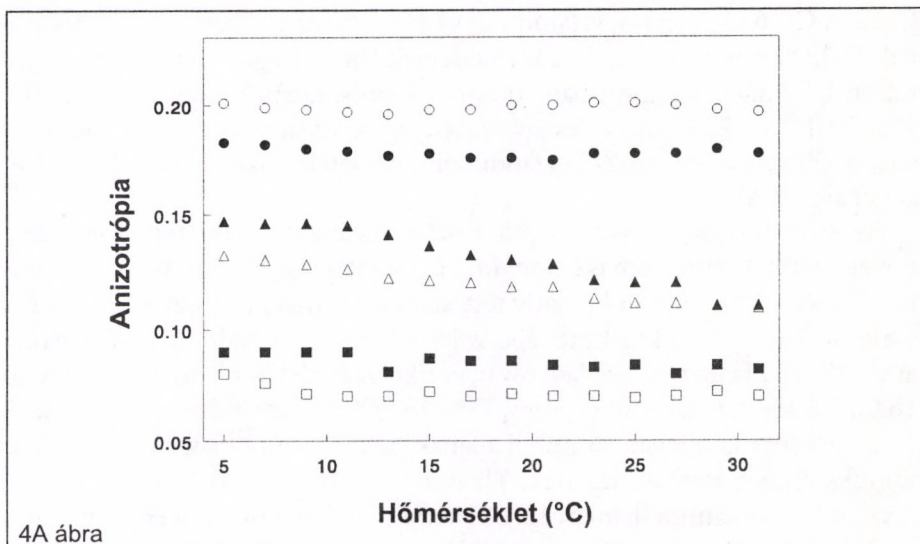


3. ábra. 2-, 12(9-anthroyloxy) sztearin (2-, 12-AS) és 16-(9-anthroyloxy) palmitinsav (16-AP) fluoreszcencia-anizotrópiája arktikus és mediterrán régióból származó rákok hepatopankrasz-foszfolipidjeiből készült vezikulákban.

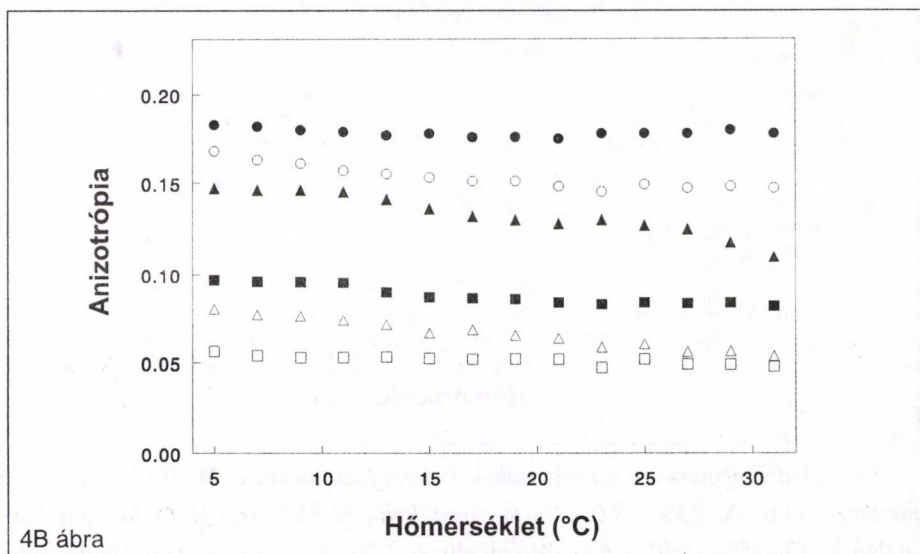
Üres szimbólumok: Pandulus borealis, zárt szimbólumok: Parapandulus sp.

●, ○: 2-AS; ▲, △: 12-AS; ■, □: 16-AP



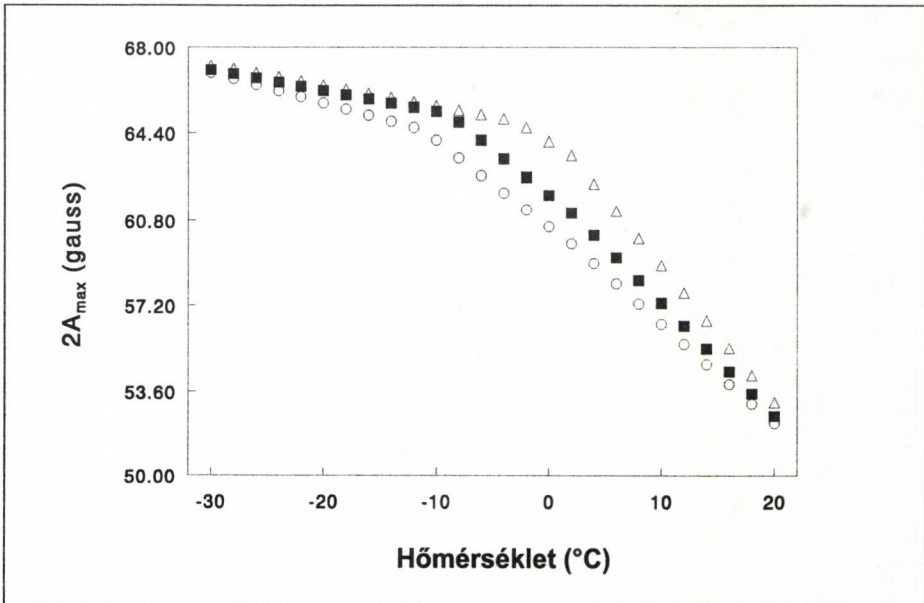


4. A–B ábra. 2-, 12-(9-anthroyloxy) sztearin (2-, 12-AS) és 16-(9-anthroyloxy) palmitinsav (16-AP) fluoreszcencia-anizotrópiája szintetikus lipidkeverékből készült vezikulában. A) tömör szimbólumok: 100% 16:0/22:6 foszfatidilkolin, üres szimbólumok: 75% 16:0/22:6 foszfatidilkolin és 25% 16:0/18:1 foszfatidiletanolamin. B) tömör szimbólumok: 100% 16:0/22:6 foszfatidilkolin, üres szimbólumok: 75% 16:0/22:6 foszfatidilkolin és 25% 18:1/22:6 foszfatidiletanolamin



C-12 és C-16 régiójára is, valamint az *O. elongatus* és a *P. borealis* membránjainak C-12 régiójára is. Ami közös mindegyik fajnál, hogy a hidegadaptált állatok foszfatidiletanolaminjában az sn-1 monoén, sn-2 polyén (18:1/20:5, 18:1/20:4, 18:1/22:6) speciestek aránya lényegesen magasabb, mint a meleghez adaptált állatok esetében. A foszfatidilkolinok esetében hasonló a helyzet (Farkas et al., 1974).

Az sn-1 monoén, sn-2 polyén foszfatidiletanolaminok rendezetlenség-növelő hatása kísérletesen is bizonyítható. Ez a tény egyébként ismert az irodalomból, és azt az amino N pozitív töltése és a szomszédos foszfolipid foszfátészter negatív töltése között fellépő kölcsönhatásnak tulajdonítják (Michaelson et al., 1974). Ha ugyanis például olyan vezikulákat készítünk, melyek vagy csak 16:0/22:6 foszfatidilkolinból, vagy 75% 16:0/22:6 foszfatidilkolinból és 25% 16:0/18:1 foszfatidiletanolaminból állanak, akkor az utóbbiak a C-2 régióban mindig rendezettebbek lesznek. Ha viszont a vezikulákba nem 16:0/18:1 foszfatidiletanolamint, hanem 18:1/22:6 foszfatidiletanolamint építünk, megfordul a helyzet: a vezikulák a C-2 régióban, de még a C-12 régióban is sokkal rendezetlenebbé válnak (4. A és B ábra).



5. ábra. Modellmembránok gél-folyadék-kristályos fázisátmenete. ■: 100% 18:0/22:6 foszfatidilkolin; Δ: 75% 18:0/22:6 foszfatidilkolin és 25% 16:0/18:1 foszfatidiletanolamin; ○: 75% 18:0/22:6 foszfatidilkolin és 25% 18:1/22:6 foszfatidiletanolamin



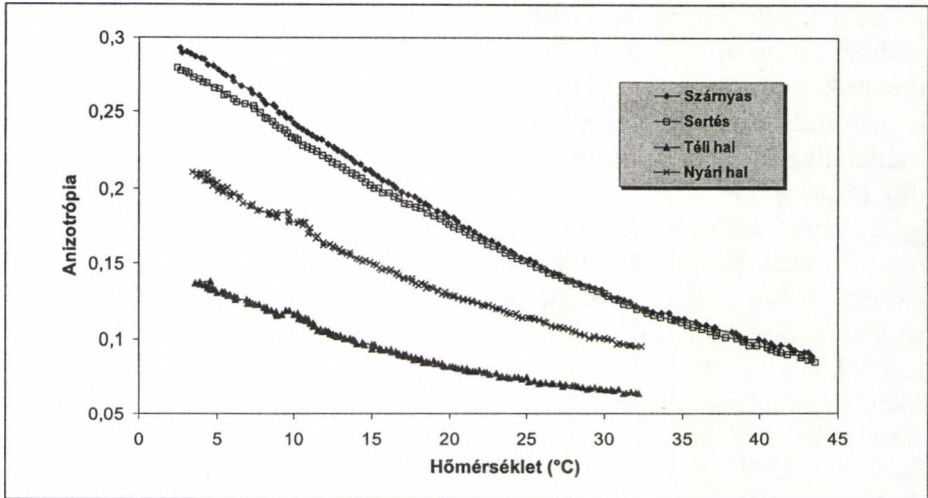
Ez a foszfolipid nemcsak a rendezettségi viszonyokat szabályozza, hanem a rendszer thermotrop fázisváltozási hőmérsékletét is. Modellkísérletekben kimutattuk, hogy azoknak a vezikuláknak a liquid-kristályos merevgél-fázisátmenete alacsonyabb hőmérsékleti régiók felé tolódik el, amelyekbe 18:0/22:6 foszfatidilkolin mellé mintegy 25% 18:1/22:6 foszfatidiletanolamint építetünk (5. ábra).

Ez a hőmérséklet-különbség a 25% 16:0/18:1 foszfatidiletanolamint tartalmazó vezikulákkal összehasonlítva mintegy 8 °C (Fodor et al., 1995). Semmiféle egyéb módosítás a foszfolipidek molekulaspecies-összetételében nincs hatással a fluiditásviszonyokra. Ha pl. patkányokat hónapokon keresztül magas linolsav- [18:2 $\omega$ 6], ill. magas [22:6 $\omega$ 3]-tartalmú diétán tartottunk, akkor az utóbbiak májának foszfatidiletanolaminjaiban és foszfatidilkolinjaiban a 18:0/20:4, és 18:0/22:6 specieszek aránya jelentősen megnövekedett, a foszfolipidekből készített vezikulák rendezetlensége mégis azonos maradt (Farkas et al., 1974).

A máj metabolikusan egy aktív szövet, zsírsavösszetételét számos tényező befolyásolhatja, többek között a táplálék. Mégis ez utóbbi hatását nagy valószínűséggel ki lehet zárni a fenti válaszok értelmezésekor, hiszen mindegyik hal tápláléka más lehetett. Így ezekből az eredményekből vonzónak látszik azt a következtetést levonni, hogy az sn-1 monoén, sn-2 polyén foszfolipidek, de különösen a foszfatidiletanolaminok aránya és a testhőmérséklet között szoros kapcsolat lehet.

## Foszfolipidek a központi idegrendszerben

Mégis, hogy kizárjunk mindenféle lehetséges diétás hatást, hasonló vizsgálatokat végeztünk a központi idegrendszer lipidjein is. Az emlősök központi idegrendszere tudvalevően igen rezisztens mindenféle ilyen hatásra, kivéve az intrauterin élet utolsó harmadáig eltelt időszakot. Viszont igen gazdag [22:6 $\omega$ 3] zsírsavban. A halak agyveleje, ámbár fejlődése nem fejeződik be az embrionális élet végével, hanem még több hónapon keresztül tart, szintén gazdag ugyanebben a zsírsavban, melynek arányát irodalmi adatok szerint (Pagliarini et al., 1986) és saját megfigyeléseink alapján (Roy et al., 1998) érdekes módon szintén nem lehet diétás úton befolyásolni. De egy hal és egy emlős agyának [22:6 $\omega$ 3] szintje között van különbség olyan értelemben, hogy az előbbiek agya gazdagabb ebben a zsírsavban. Jelentős eltérések vannak a különböző testhőmérsékletű halak agyának zsírsavösszetétele között olyan értelemben, hogy evolúciósan alacsony hőmérséklethez (boreális régiók) adaptálódott halak agyában a [22:6 $\omega$ 3] szintje magasabb (28,7), mint a szub-



6. ábra. Agyi foszfolipidek fluiditása evolúciós viszonylatban

tópusi körülmények között élő halak agyában (19,8), míg a mérsékelt égövi halak agyának [22:6 $\omega$ 3] tartalma a két érték közé esik. Érdekes módon azonban, a mérsékelt égövi halak agyában a [22:6 $\omega$ 3] szintje a testhőmérséklet szerint és a májknál már megismert módon változik (21,7, ill. 23,5 nyári, ill. téli akklimatizáció). Minthogy azonban ezek a halak alacsony hőmérsékletek mellett nem táplálkoznak, e válaszok nem vezethetők vissza diétás okokra.

A különböző eredetű agyak foszfolipidjeiből képzett vezikulák fluiditása a testhőmérsékletéhez igazodik, vagyis az emlősök és madarak agyának foszfolipidjei merevebb vezikulákat képeznek, mint a meleg vízhez vagy hideg vízhez adaptált halakéi (6. ábra).

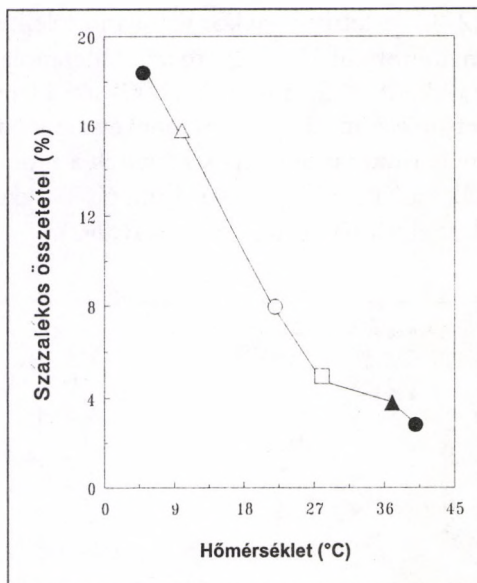
Összehasonlítva a testhőmérsékleteken mért fluiditásértékeket, kitűnik, hogy azok nagyjából azonosak, ami a foszfolipidek szintjén egy 100%-os kompenzációt sejtet. Behan-Martin és munkatársai a törzsfajlás különböző szintjein élt és így eltérő klimatikus körülmények között élő gerincesek agyának szinaptikus vezikuláinak fluiditását vizsgálva hasonló eredményeket kaptak (Behan-Martin et al., 1993).

Bár a fenti szerzők nem végeztek részletes vizsgálatokat a szinaptikus vezikulák lipidjein, saját méréseink azt látszanak igazolni, hogy kapcsolat lehet, a májhoz hasonlóan, a foszfolipidek molekuláris összetétele, a foszfolipid-vezikulák fluiditása és a testhőmérséklet között. Figyelembe véve, hogy a szinaptikus vezikulák diacil foszfolipidjeinek és az agy összes diacil foszfolipidjeinek molekulaspecies-összetétele majdnem azonos, a 7. ábrán az összes



rendelkezésre álló irodalmi és saját elemzési adataink alapján összehasonlítást végeztünk a foszfatidiletanolaminok összes 1-monoen-2-polyen speciestek szintje és a testhőmérséklet között a hideghez adaptált halaktól a madarakig.

Látható, hogy fordított viszony van a testhőmérséklet és e molekulaspeciestek mennyisége között. Más, itt nem részletezett mérések azt mutatják, hogy azoknak a molekulaspeciesteknek a mennyisége, amelyek [22:6 $\omega$ 3] zsírsavat tartalmaznak az sn-2 helyzetben (18:0/22:6+18:1/22:6), közel azonos a gerinces törzsfajlódás, ill. a testhőmérsékleti evolúció során. Egyelőre senki sem érti a [22:6 $\omega$ 3] kiemelt szerepét a központi idegrendszerben. A jelen eredményekből arra lehet következtetni, hogy a fenti molekulaspeciestek szerepet játszhatnak a központi idegrendszer működése, az agyi membránok strukturális integritásának és biofizikai paramétereinek meghatározásában. Erre utal az is, hogy azoknak az állatoknak tanulási készsége, amelyek [ $\omega$ 3] zsírsavszegény diétán éltek, és így agyukban is alacsonyabb volt a [22:6 $\omega$ 3] szintje, elmaradt az [ $\omega$ 3] zsírsavdús takarmányon tartott állatoké mögött (Bourre et al., 1984; Yamamoto et al., 1994). Egyes szerzők egyenesen arra a következtetésre jutottak, hogy az ember mentális apparátusának kvalitása még az intrauterin élet során dől el, és attól függ, hogy az agy mennyi [22:6 $\omega$ 3] zsírsavhoz jutott (Holman et al., 1991).



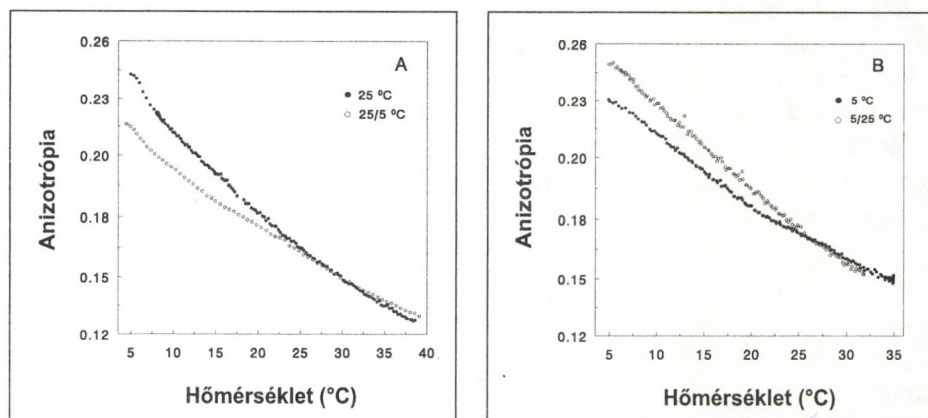
7. ábra. 1-monoen-2-polyen foszfolipidek mennyisége a testhőmérséklet függvényében.

●: téli ponty;  $\Delta$ : pisztráng; ○: nyári ponty;  
□: trópusi hal;  $\blacktriangle$ : emlős; ●: madár

## Foszfolipidek és hőmérsékleti stressz

Elvárható, hogy a fentebb az ún. „long term” adaptáció során szerkezetbeli és fluiditásbeli válaszokat hőmérsékleti stressz során is észleljük, abból kiindulva, hogy ezeknek a válaszoknak gyorsnak, reverzibilisnek kell lenniök, és nem szabad függeniök az állat hőmérsékleti előéletétől. E tétel bizonyítására tett erőfeszítéseink részleges sikert hoztak. Ha hidegadaptált halakat 2 napra

22 °C-ra tettünk, akkor valóban észlelhető elmozdulás történt pl. a májplazmamembrán 18:1/22:6 foszfatidiletanolamin-szintjében: az ez idő alatt felére csökkent, és fordítva: ha 22 °C-hoz adaptált halakat ugyanennyi időre 5 °C-ra tettünk, e species aránya megkétszereződött. Ugyanezen plazmamembránból mért fluiditásvizonyok követték a molekulaspecies összetételében fent mért válaszokat: melegstressz fluiditás-csökkenést, hidegstressz fluiditás-növekedést eredményeztek (8. A és B ábra).



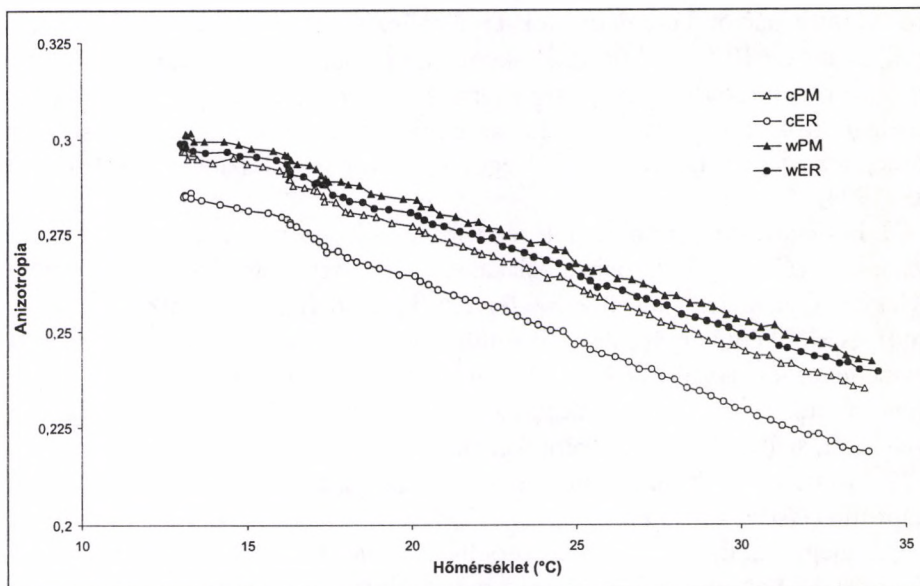
8. ábra. Hőmérsékleti stressz hatása májplazmamembrán fluiditásvizonyaira. 5 °C, ill. 25 °C a kiindulási, adaptációs hőmérséklet állapotát, 25/5 °C (A) pedig a hidegstressz, ill. 5/25 °C (B) a melegstressz állapotát jelöli

Halagyakból nem preparáltunk semmiféle membránt ehhez a kísérlethez, hanem csak az összes foszfolipidet vizsgáltuk: a 18:1/22:6 foszfatidiletanolamin-szintje 8,4%-ról 10,8%-ra növekedett egy 2 napos hidegstressz és 18,4 %-ról 11,5 %-ra csökkent egy 2 napos melegstressz után. A fluiditásértékek ennek megfelelően változtak (adatokat nem mutatunk be).

Ha megvizsgáljuk a kompenzáció mértékét, kitűnik, hogy ezek a hatások a legtöbb esetben csak egy nagyon kis mérvű kompenzációt váltottak ki a plazmamembránban (és a többi intracelluláris membránban), vagyis ezekkel a fluiditásértékekkel csak nagyon kis mértékben tudták az állatok kivédeni a hőmérsékletnek a membránok rendezettségére gyakorolt hatását. Más szóval az ún. „homeoviszkozus hatékonyság” igen kis mértékű volt, legalábbis az általunk vizsgált rendszerben.

Nem lehetetlen, hogy élő sejtek élénkebb választ adnának. A kérdés eldöntésére több kísérletes megközelítést tettünk:





9. ábra. Eltérő hőmérsékleten keltetett halikra plazmamembrán és endoplazmás retikulum fluiditása DPH fluoreszcens jelölő anizotrópia paramétere alapján.  
cPM és cER jelöli a hidegen (19 °C),  
wPM és wER a melegen (25 °C) kelt ikra plazmamembrán (PM)  
és endoplazmatikus retikulum (ER) membránjait

1. Halikrákat két eltérő hőmérsékleten (25 °C és 19 °C) hagyunk fejlődni, és a frissen kelt lárvákból készített plazmamembrán és endoplazmás retikulum fluiditását vizsgáltuk DPH fluoreszkáló festéket használva. A barázdálódás 25 °C-on igen gyorsan lezajlott (24 óra), 19 °C-on kb. kétszer ennyi idő alatt. Mégis az alacsonyabb hőmérsékleten keltett lárvákból készített membránok fluidabbaknak bizonyultak, mint a 25 °C-on kelt lárvák membránjai (9. ábra). Ez arra mutat, hogy a barázdálódó sejtek membránjaik biofizikai paramétereit igen gyorsan hozzáigazítják a környezet hőmérsékletéhez.

Ezzel párhuzamosan a 19 °C-on barázdálódó ikrákban, ill. a kikelt lárvák plazmamembránjaiban vagy endoplazmás retikulumjaiban a 18:1/22:6 és a 18:1/20:4 foszfatidiletanolamin-szintje magasabb lett, mint a 25 °C-on barázdálódó ikrákban.

2. Neuronokat izoláltunk hideghez és meleghez adaptált halak agyából egy mások által már bejátszott technikával (Tocher és Sargent, 1992), a sejteket DPH-PA fluoreszkáló festékkel jelöltük. Ez a festék töltésénél fogva a plazmamembrán külső lemezében marad, nem hatol be a sejtbe, így annak fluiditására

ról ad információt. Ha a neuronokat meleghez adaptált halak agyából készítettük, és azokat 10 °C-ra hűtöttük, akkor már 10 perc után jelentős növekedést mértünk a fluiditásban, ha pedig ugyanezen sejteket kb. 90 perc után vissza-melegítettük, a fluiditás visszaállt az eredeti értékre. Ugyanezt a kísérletet hideghez adaptált neuronokon elvégezve, ellentétes választ kaptunk (Buda et al., 1994) (10. ábra).

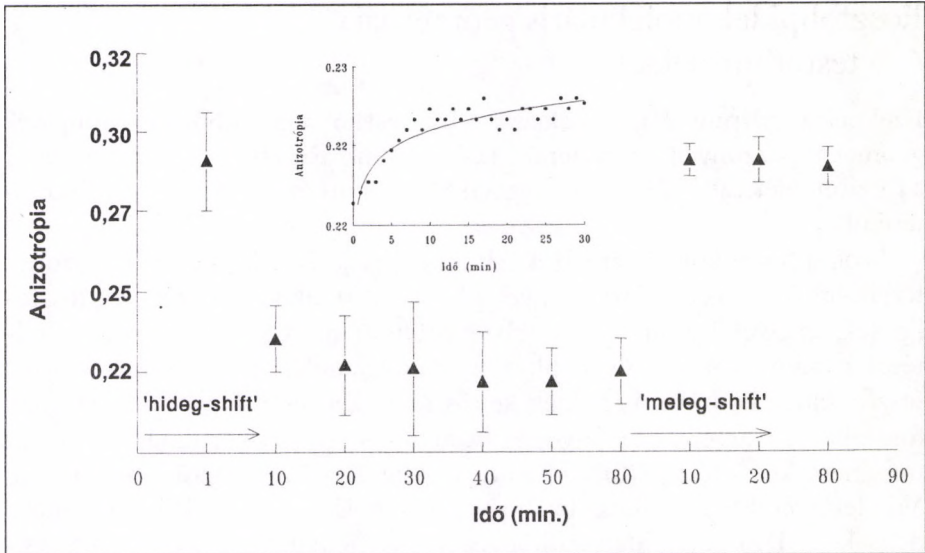
3. Hideghez adaptált halak feji vénájába kanült vezetünk, úgy, hogy a kanül vége hozzáférhető volt, majd a halakat egy termosztálható akváriumba tettük. Megfelelő adaptációs idő után melegítettük, majd visszahűtöttük az akváriumot, és időnként vért vettünk a kanülon keresztül. A vérből izoláltuk a vörösvérsejteket, és ugyancsak DPH-PA-val jelöltük fluiditásmérés céljára. A 11. ábra mutatja, hogy a mért fluiditás a teshőmérséklet változásának megfelelően változott, szinte °C-nyi érzékenységgel.

A kísérletet *in vitro* körülmények között megismételve, hasonló eredményt kaptunk (Dey et al., 1993).

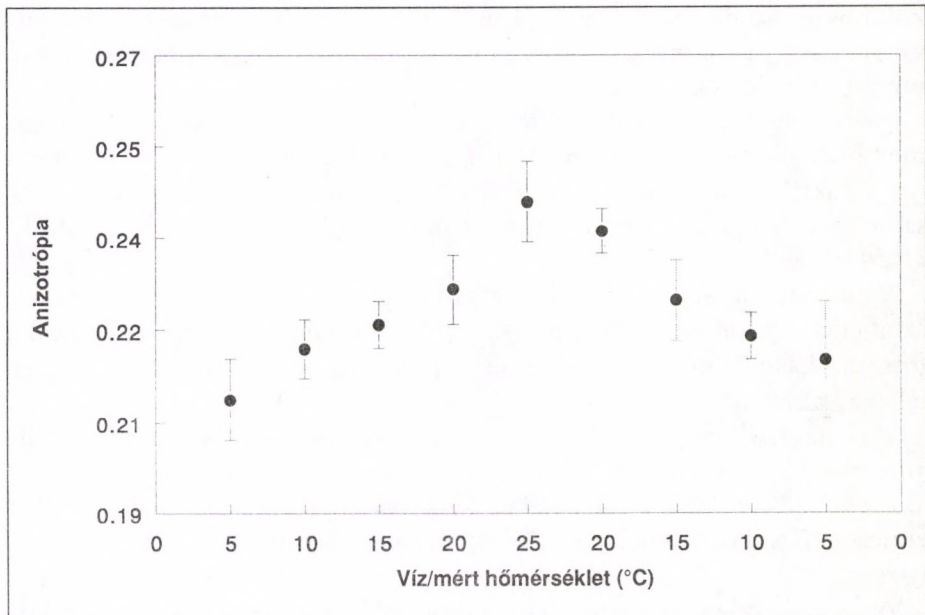
Megjegyezzük, hogy a két utóbbi *in vitro* kísérletben a foszfolipid-összetételekben semmiféle változást nem tudtunk kimutatni, ami nem jelenti azt, hogy ezen a szinten nem történtek változások, csupán azt, hogy a technika nem volt elég érzékeny ilyen kismérvű változások detektálására. Ez utóbbi feltételezést az a korábbi kísérletünk is alátámasztja, melyben meleghez adaptált halmájszeleteket [ $1-^{14}\text{C}$ ] olajsav és [ $^3\text{H}$ ] palmitinsav jelenlétében inkubáltunk két szélsőséges hőmérsékleten (5 °C, 25 °C), és mértük a  $^{14}\text{C}$  és a  $^3\text{H}$  arányát a foszfatidiletanolamin sn-1 pozíciójában. Kitűnt, hogy 5 °C-on már néhány óra elteltével ez az arány 0,5- ról 1,3-ra emelkedett (Farkas és Roy, 1989). Természetesen azt a lehetőséget sem lehet kizárni, hogy ezekben a gyors válaszokban egyéb, nem lipidtemészetű membránkomponensek (pl. fehérjék) is részt vesznek.

Felmerül az a kérdés is, hogy nem valami műterméket mértünk-e. Mindenféle meggondolás azonban azt sugallja, hogy mindkét esetben a sejtek aktív válaszáról van szó. Ha ui. csak a hőmérséklet passzív hatásáról volna szó, akkor a termodinamika törvényei szerint pont ellenkező effektussal találkoztunk volna: a hőmérséklet csökkenésekor a rendszereknek merevedni, növelésekor pedig fluidizálódni kellett volna. Egy további bizonyíték az aktív válasz mellett az, hogy hidegstressz hatására egy ún. delta-9 deszaturáz indukálódik igen rövid idő alatt (Tiku et al., 1996). Ez az enzim alakítja a sztearinsavat (18:0) olajsavvá (18:1ω9), és vonzónak látszik feltételezni, hogy ez az olajsav épül be a foszfatidiletanolamin sn-1 helyzetébe. Valóban Tiku és munkatársai kimértek egy jelentékeny növekedést a 18:1/22:6 foszfatidiletanolamin szintjében.





10. ábra. In vitro hőmérséklet-shift hatása a neuronmembránok fluiditására. Az ábra a membránba illesztett DPH-PA fluoreszcens jelölt anizotrópia paraméterét mutatja



11. ábra. DPH-PA fluoreszcencia-anizotrópia paraméterének változása hal-vörösvérsejtekben in vivo hőmérséklet akklimatizáció során

## Foszfolipidek molekuláris geometriája és a testhőmérséklet

Ezeknek az adaptív válaszoknak az értelmezésekor a különböző foszfolipidek geometriai viszonyait is figyelembe kell vennünk. Régebb óta ismeretes, hogy a foszfolipidek „alakja” eltérő, függően a fejcsoport és a zsírsavláncok térkitöltésétől.

Azok a foszfolipidek, amelyeknek fejcsoportja és zsírsavlánca kb. azonos térkitöltésű, hengeres alakúak, ilyen pl. a foszfatidilkolin, míg azok a foszfolipidek, amelyek fejcsoportja kisebb térkitöltésű, mint a zsírsavláncok térkitöltése, kónikus alakúak, ilyen pl. a foszfaidiletanolamin. A hengeres alakú foszfolipidek könnyen képeznek kettős rétegeket, nem így a kónikus alakú foszfolipidek, amelyek bizonyos és itt nem részletezett körülmények között ún. „nem kettősréteg-” (fordított hexagonális fázis,  $H_{II}$ )-fázisba mennek át. Minden membrán tartalmaz bizonyos mennyiségű  $H_{II}$ -fázist képező komponenseket. Maga a membrán testhőmérsékleten nem megy át fordított hexagonális fázisba.

Kimutatták azonban, legalábbis mikroorganizmusoknál, hogy a testhőmérséklet és membránjaik „nem kettősréteg” tranzíciója közötti hőmérsékletkülönbség állandó, és ez nem több, mint kb. 15 °C (Morein et al., 1996). Nyilvánvaló, hogy gerincesekre hasonló törvényszerűség érvényes, de ilyen típusú méréseket még nem végeztek.

Azt is logikusnak látszik feltételezni, hogy a testhőmérséklet változásakor membránjaik „nem kettősréteg” tranzíciós hőmérséklete is változik. Ez lehet a magyarázata annak, hogy a hidegadaptált halak membránjaiban miért magasabb a foszfatidiletanolamin szintje és fordítva (Thillard és de Bruin, 1981; Hazel és Carpenter, 1985).

Vannak irodalmi adatok, melyek azt mutatják, hogy a foszfatidiletanolamin szintjének illetően változása igen gyors (Hazel és Landrey, 1988). A 18:1/22:6 foszfatidiletanolamin egy kónikus alakú molekula, és egyik szerepe éppen ez lehet a halakban.

Kimutattuk, hogy ennek a speciesnek szemben más foszfatidiletanolaminokkal a „nem kettősréteg” fázisátmenete feltűnően alacsony (Giorgione et al., 1995) (3. táblázat), így szintjében kis változás is jelentősen hozzájárulhat ennek az ún. „hőmérséleti ablak”-nak, ill. a membránok stabilitásának szabályozásához.

Az a tény, hogy a hidegvérűek a hőmérséklet csökkenése során kónikus alakú foszfolipideket igényelnek, már régóta ismeretes (Wieslander et al., 1980).



3. táblázat

Néhány foszfolipid hatása a 16:1/16:1 PE „nem kettősréteg”  
(hexagonális) fázisátmeneti hőmérsékletére (TH)

Hozzáadott foszfolipid	T <sub>h</sub> változása (°C/adalék lipid mol frakciója)
18:0/22:6 PE	-84 ± 6
18:1/18:1 PE	-72 ± 19
18:1/22:6 PE	-143 ± 8
18:1/22:6 PC	+265 ± 8

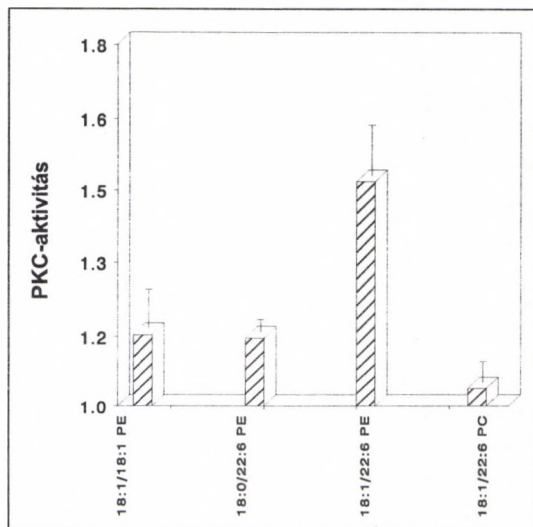
Más, „nem kettősréteg”-képző foszfolipidek az éterlipidek, ezek közül is az ún. plazmalogének, melyek egy vinyléter kötést tartalmaznak az sn-1 helyzetben. Kimutatták, hogy az etanolamin plazmalogének „nem kettősréteg” fázisátmeneti hőmérséklete lényegesen alacsonyabb, mint a diacyl formáké (Lohner, 1966). Bizonyos membránfeleségek különösen gazdagok etanolamin plazmalogénekben, ilyen a központi idegrendszer vagy pl. a plazmamembránok. Ezen a komponensek arányának hőmérsékletfüggő változása hozzájárulhat a membránok fiziokémiai paramétereinek meghatározásához az adott hőmérsékleten. Ezzel a koncepcióval összefüggésben kimutattuk, hogy az alacsony hőmérsékleten fejlődő hallárva plazmamembránjában valóban magasabb az etanolamin plazmalogének szintje (65,2% vs. 52,5%), továbbá azt, hogy halagyakban szintje gyorsan és olyan irányban változik, amilyen az aktuális hőmérséklet (4. táblázat). Ezek a lipidek szintjében bekövetkező változások nyilvánvalóan szerepet játszanak a membrán „nem kettősréteg” fázisátmeneti hajlandóságának meghatározásában.

4. táblázat

Foszfátidiletanolamin alosztályok mennyiségének változása extrém hőmérsékletekhez adaptált és hőmérsékleti stressznek alávetett (72 órá) hal agyában

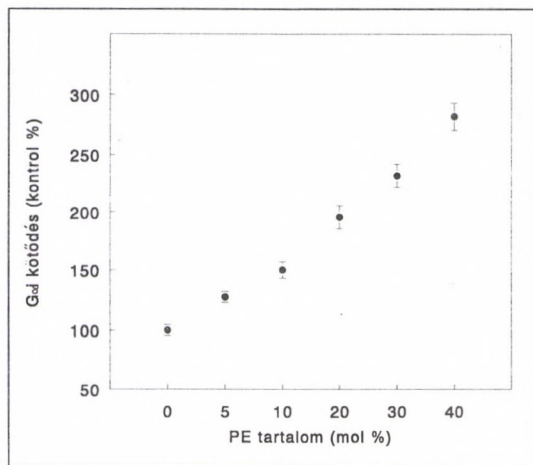
	22 °C	22/5 °C	22/5/22 °C	5 °C	5/22 °C	5/22/5 °C
Diacyl	63,7	20,0	42,0	20,0	60,5	33,0
Alkylacyl	3,5	9,2	4,6	3,1	3,2	29,0
Alkenylacyl	32,8	70,8	53,6	76,9	36,2	43,0

Annak ellenére, hogy ez a fázisátmenet testhőmérsékleten nem következik be, számos reakció (Ca<sup>++</sup>ATP-ase, foszfolipáz A<sub>2</sub>, PKC-aktivitás, szolubilis G-proteinek kötődése membránokhoz stb.) igényeli ezen lipidek jelenlétét (Kinnunen, 1996). A 18:1/22:6 foszfátidiletanolamin PKC-aktivitásának szabályozásában játszott szerepét a 12. ábra mutatja.



12. ábra. Különböző foszfolipidek hatása a PKC-aktivitásra

membránokhoz kísérletes rendszerekben, minél szívesebben képez a hozzáadott foszfatidiletanolamin  $H_{II}$  fázist, másrészt minél nagyobb a koncentrációja (Escriba et al., 1997) (13. ábra).



13. ábra. Foszfatidiletanolamin (PE) hatása a  $G_{ai}$  alegység liposzómához való kötődésére. A liposzómák tiszta foszfatidilkolint (0 mol% PE), majd növekvő, 5–40 mol%-ban PE-t tartalmaztak

Ismeretes, hogy ezen enzim aktivitásához „nem kettősréteg”-képező lipideket is igényel, ezt az igényt elsősorban digliceridek elégítik ki. Ha azonban a reakcióelegyhez 18:1/22:6 foszfatidiletanolamin is adunk, az enzim aktivitása tovább növekszik (Giorgione et al., 1995). Arra nézve még nincsenek közvetlen megfigyeléseink, hogy ugyan-ez a foszfolipid elősegíti-e a szolubilis G-proteinek asszociációját membránokhoz, arra nézve viszont igen, hogy egyrészt egyfajta G-protein annál könnyebben asszociálódik

Így a 18:1/22:6 foszfatidiletanolamin a jelátvitelben, ill. annak testhőmérséklet-függő szabályozásában is lehet szerepe.

Külön figyelmet kell szentelnünk az etanolamin plazmalogének dinamikájára a halagyan. Mint említettük, ezek a molekulák kónikus alakúak, és mint ilyenek, igen könnyen vesznek részt sejtfúziós folyamatokban. Bizonyított tény, hogy a vezikulák közötti fúzió annál gyorsabb, minél telítetlenebb etanolamin plazmalogének vesznek részt a folyamatban. Bizonyos vezikula-



összetétel mellett a fúzió sebessége megközelíti a szinaptikus vezikulák és a posztzinaptikus membránok között lejátszódó fúziót (Glaser és Gross, 1994). Bár nekünk közvetlen adataink nincsenek, vonzónak látszik feltételezni, hogy a halak agyában a hidegstressz során megnövekedett etanolamin plazmalogénszint az alacsony hőmérséklet neurális transzmisszióra gyakorolt hatását lehet hivatva ellensúlyozni. Mindezek alapján feltételezhetjük, hogy az 1-monoen, 2-polyen foszfatidiletanolamin, valamint az etanolamin plazmalogének valamiféle hőmérsékleti stressz-elhárító szerepet játszanak a membránokban, és legfontosabb funkciójuk e szerkezetek strukturális és funkcionális integritásának biztosítása változó környezeti viszonyok között.

### Összefoglalás

A membránalkotó foszfolipidek összetételének, a membránok fluiditásának a környezeti hőmérséklet változásainak során bekövetkező válaszok tanulmányozásakor megállapítottuk, hogy egyes hidegvérű szervezetekben bizonyos foszfolipid-molekulák kiemelt jelentőséggel bírnak. A membránok rendezettségének (fluiditásának) szabályozására a hőmérsékleti adaptáció során azok a specíesek a legalkalmasabbak, amelyek az sn-1 helyzetben egy monoen, az sn-2 helyzetben egy polyen (elsősorban dokozahexaénsav) zsírsavat tartalmaznak. Az sn-1 helyzetbe beépített monoen zsírsav azon túlmenően, hogy minden más speciesszel ellentétben nemcsak növeli a membránok fluiditását és csökkenti a liquidkristályos merevgél-fázisátmenetet a testhőmérséklet csökkenésével párhuzamosan, hanem a foszfatidiletanolamin és az etanolamin plazmalogének esetében szabályozza az ún. „kettősréteg”- „nem kettősréteg”-fázisátmenet hőmérsékletét is, és ezzel hozzájárul a membránok funkcionális integritásának biztosításához változó hőmérsékleti viszonyok között.

### Irodalom

- Applegate, K. R., Glomset, K. R.: Effect of acyl chain unsaturation on the conformation of model diacylglycerols: a computer modeling study. *J. Lipid Res.*, 1991. 32, 1635–1644.
- Behan-Martin, M. K., Jones, G. R., Bowler, K., Cossins, A. R.: A near perfect temperature adaptation of bilayer order in vertebrate brain membranes. *Biochim. Biophys. Acta*, 1993. 1151, 216–222.
- Bourre, J. M., François, M., Youyou, A., Dumon, O., Piciotti, M., Pascal, G., Durand, G.: The effects of dietary  $\alpha$ -linolenic acid on the composition of nerve membranes, enzymatic activity, amplitude of electrophysiological parameters, resistance to poisons and performance of learning tasks in rats. *J. Nutr.*, 1989. 119, 1880–1892.

- Buda, Cs., Dey, I., Balogh, N., Horváth, L.I., Maderspach, K., Juhász, M., Yeo, Y. K.: Structural order of membranes and composition of phospholipids in fish brain cells during thermal acclimatization. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.*, 1994. 91, 8234–8238.
- Coolebar, K. P., Beroe, C. B. Keough, K. M. W.: Gel to liquid-crystalline phase transitions of aqueous dispersions of polyunsaturated mixed-acid phosphatidylcholines. *Biochemistry*, 1983. 22, 1466–1473.
- Dey, I., Buda, Cs., Wiik, T., Halver, J. E., Farkas, T.: Molecular and structural composition of phospholipid membranes in livers of marine and freshwater fish in relation to temperature. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.*, 1993. 90, 7498–7502.
- Evans, R. W., Williams, M., Tinoco, J.: Surface areas of 1-palmitoyl phosphatidylcholines and their interactions with cholesterol. *Biochem. J.*, 1987. 245, 455–467.
- Farkas, T., Herodek, S.: The effect of environmental temperature on the fatty acid composition of crustacean plankton. *J. Lipid Res.*, 1964. 5, 369–373.
- Farkas, T., Csengeri, I.: Biosynthesis of fatty acids by the carp, *Cyprinus capio* L in relation to environmental temperature. *Lipids*, 1976. 11, 401–407.
- Farkas, T., Dey, I., Buda, Cs., Halver, J. E.: Role of phospholipid molecular species in maintaining lipid membrane structure in response to temperature. *Biophys. Chem.*, 1994. 50, 147–155.
- Fodor E., Jones, R. H., Buda, Cs., Kitajka, K., Dey, I., Farkas, T.: Molecular architecture and biophysical properties of phospholipids during thermal adaptation in fish: an experimental and model study. *Lipids*, 1995. 30, 1119–1126.
- Gawrisch, K., Holte, L. L.: NMR investigations of non-lamellar phase promoters in the lamellar phase state. *Biophys. Chem.*, 1996. 81, 105–116.
- Glaser, P. E., Ross, R. W.: Plasmamylethanolamine facilitates rapid membrane fusion: a stopped flow kinetic investigation correlating the propensity of a major plasma membrane constituent to adopt an  $H_{II}$  phase with its ability to promote membrane fusion. *Biochemistry*, 1994. 33, 5805–5812.
- Hazel, J. R., Carpenter, R.: Rapid changes in the phospholipid composition of gill membranes during thermal acclimation of the rainbow trout, *Salmo gairdneri*. *J. comp. Physiol. B.*, 1985. 155, 597–602.
- Hazel, J. R. Prosser, C. L.: Molecular mechanism of temperature compensation in poikilotherms. *Physiol. Rev.*, 1974. 54, 620–627.
- Hazel, J. R., Landrey, A. S.: Time course of thermal adaptation in plasma membranes of trout kidney. I. Headgroup composition. *Am. J. Physiol.*, 1988. 255, R622–R627.
- Holman, R. T., Johnson, S. B., Ogburn, P. L.: Deficiency of essential fatty acids and membrane fluidity during pregnancy and lactation. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.*, 1991. 88, 4835–4839.
- Kemp, P., Smith, M. W.: Effect of temperature acclimatization on the fatty acid composition of goldfish intestinal lipids. *Biochem. J.*, 1970. 117, 9–15.
- Knippprath, W. G., Mead, J. F.: Influence of temperature on the fatty acid pattern of mosquitofish (*G. affinis*) and guppies (*L. reticulatis*). *Lipids*, 1, 1966. 113–117.
- Lohner, K.: Is the high propensity of ethanolamine plasmalogens to form non-lamellar lipid structures manifested in the properties of biomembranes? *Chem. Phys. Lipids*, 1996. 81, 167–184.
- Michaelson, D. M., Horwitz, A. M., Klein, M. P.: Head group modulation of membrane fluidity in sonicated phospholipid dispersions. *Biochemistry*, 1974. 13, 2605–2612.



- Morein, S., Golini, E. S., Rilfos, L., Lindblom, G.: Wild-type *Escherichia coli* cells regulate the membrane lipid composition in a „window” between gel and non-lamellar structures. *J. Biol. Chem.*, 1986. 271, 6801–6809.
- Pagliarini, A., Pirini, M., Trigari, G., Ventrella, V.: Effect of diets containing different oils on brain fatty acid composition in sea bass (*Dicentrarchus labrax* L.) *Comp. Biochem. Physiol.*, 1986. 83B, 277–282.
- Precht, H., Christophersen, J., Hensel, J., Larcher, W.: *Temperature and Life*. Springer Verlag, New York, 1973. 330 p.
- Roy, R., Fodor, E., Kitajka, K., Farkas, T.: Fatty acid composition food only slightly affects physicochemical properties of liver total phospholipids and plasma membranes in cold adapted fresh water fish. *Fish Physiol. Biochem.*, 1998. In press.
- Sinensky, H.: Adaptation a homeostatic process that regulates the viscosity of membrane lipids in *Escherichia coli*. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.*, 1974. 71, 522–525.
- Singer, S. J., Nicholson, G. L.: The fluid mosaic model of the structure of cell membranes. *Science*, 1972. 175, 720–731.
- Thillaard, G., van den Bruin, G.: Influence of environmental temperature on mitochondrial membranes. *Biochem. Biophys. Acta*, 1981. 640, 439–447.
- Tocher, D. R., Sargent, J. R.: Direct effects of temperature on phospholipid and polyunsaturated fatty acid metabolism in isolated brain cells from rainbow trout, *Onchorhynchus mykiss*. *Comp. Biochem. Physiol.*, 1992. 101B, 353–359.
- Wieslander, A., Christiansen, A., Rilfors, Lindbrom, H.: Lipid bilayer stability in membranes. Regulation of lipid composition in *Acheloplasma laidlawii* as governed by molecular shape. *Biochemistry*, 1980. 19, 3650–3655.
- Zabelinskii, S. A., Brovtsyna, N. B., Cheboterova, M. A., Gorbunova, O. B., Krivchenko, A. I.: Comparative investigation of lipids and fatty acid composition of fish gills and mammalian lungs. A model of the membrane lipid component areas. *Comp. Biochem. Physiol.*, 1995. 111b 127–140.
- Yamamoto, N., Okaniwa, Y., Mori, S., Nomura, M., Okuyama, H.: Effects of a high-linoleate and high- $\alpha$ -linolenate diet on learning ability of aged rats. *J. Gerontol.*, 1991. 46, B17–B22.
- Yehuda, S., Rabinowitz, S., Mostofsky, D.: Modulation of learning and neuronal membrane composition in the rat by essential fatty acid preparation: time-course analysis. *Neurochem. Res.*, 1998. 23, 627–634.





**VIII. BIOLÓGIAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYA**





Venetianer Pál

az MTA rendes tagja

# A GÉNSEBÉSZ MŰSZEREI: A RESTRIKCIÓS- MODIFIKÁCIÓS ENZIMEK

Elhangzott 1996. november 19-én

Mielőtt előadásom tárgyára térnék, szeretnék egy bevezető megjegyzést tenni. A kísérleti természettudományok terén tartott akadémiai székfoglaló előadások soha nem egy ember munkáján alapulnak, sokszor igen nagyszámú közreműködő neve olvasható az utolsóként vetített dián. Ez természetesen most is így lesz. A sok közreműködő közül azonban most előljáróban szeretném kiemelni munkatársam és barátom, *Kiss Antal* nevét, aki 1974-ben frissen végzett orvoscént csatlakozott munkacsoportomhoz, és ezzel kezdődött nálunk ennek a témának a kutatása, amely ma is az ő irányítása alatt folyik. Amit tehát ma elmondandó vagyok, abban neki oroszlánrésze volt, mind mauálishan, mind szellemileg.

Kilenc évvel ezelőtt tartott akadémiai levelező tagi székfoglaló előadásomat azzal a gondolattal kezdtem, hogy a molekuláris biológia nagy – dátumszerűen a Watson–Crick-modell megszületéséhez, 1953-hoz köthető – forradalmából a magyar tudomány úgyszólván kimaradt, viszont abba a – második molekuláris biológiai forradalomnak nevezhető – izgalmas szakaszba, amelyet a rekombinációs DNS-technológia vagy népszerű nevén génsebészeti megszületése jelentett, a magyar tudomány és benne én, illetve munkacsoportom már teljes intenzitással bekapcsolódhattunk. Ez a forradalom is meglepően pontosan időhöz köthető, 1972–73-ban történt. Technikai-módszertani szempontból

ennek legfontosabb előfeltétele a restrikciós endonukleáz enzimek felfedezése és hatásmódjuk megismerése volt. Pontosan emlékszem, hogy milyen inspiráló hatással volt rám a PNAS 1972 novemberi számának átlapozása, amelyben hat cikk foglalkozott ezzel a kérdéssel, amiről azonnal ismertetőt tartottam az intézetben, és elkezdtük az ezzel kapcsolatos munkát.

Ma a restrikciós-modifikációs enzimek előállításával egy évi 100–110 millió dolláros termelési értékű iparág foglalkozik, ezek az enzimek mindennemű géntechnológiai kutatás és kísérleti munka legfontosabb, nélkülözhetetlen eszközei, segédanyagai, az előadásom címével választott metafora szerint ezek a génszobrász műszerei, amelyek lehetővé teszik a DNS kezelhető méretű darabokká vágását meghatározott pontokon. Remélem, meg tudom Önöknek mutatni, hogy e gyakorlati fontosságuktól eltekintve is hallatlanul érdekes kutatási objektumok – még akkor is, ha az ember nem feltétlenül osztja Arthur Kornberg nézetét, aki szerint olyan enzim nincs a világon, amelyik ne volna nagyon érdekes („I have yet to see an enzyme that proves to be uninteresting”).

A történet 1952-ben kezdődött, amikor a molekuláris biológia egyik alapító atyja, Salvador Luria megfigyelt egy akkor megmagyarázhatatlannak tűnő jelenséget, amelyet fágrestrikciónak nevezett el. Ennek lényege, hogy egy bakteriofág fertőzőképessége függ az előéletétől: ugyanaz a fág az *Escherichia coli* B törzset sokkal hatékonyabban fertőzi, ha az előző generációban ugyancsak a B törzsen nőtt, és nem például a K törzsen. A dolog fordítva is igaz: a K törzsen nőtt fág a K törzset fertőzi sokkal hatékonyabban, mint a B-t. A jelenség magyarázatára egy akkor még fiatal svájci kutató, Werner Arber – később megérdemelt Nobel-díjjal honorált – munkássága kínált magyarázatot 1962-ben. Arber feltételezte, hogy a különböző baktériumtörzsek olyan törzs-, illetve fajspecifikus enzim párokkal rendelkeznek, amelyek egyik tagja a DNS bizonyos szekvenciaelemeit felismerve azokat kémiaiilag modifikálja, másik tagja pedig ugyanezeket a szekvenciaelemeket felismeri és hasítja, ha nincsenek modifikálva, de érintetlenül hagyja, ha modifikálva vannak. A megjósolt enzimek létének direkt bizonyítása sokáig váratott magára, mert a kutatás elsősorban az *E. coli* B és K törzsek enzimeire koncentrált, amelyekről ma már tudjuk, hogy a bonyolultabb és nehezebben jellemezhető, ún. I. típusúhoz tartoznak. A molekuláris biológiai kutatások eszközeiként kizárólag a II. típusú enzimek használatosak, és a mai előadásban is kizárólag ezekről lesz szó. Az első II. típusú restrikciós enzimet a hetvenes évek elején – a később szintén Nobel-díjjal jutalmazott – Hamilton Smith izolálta, és tőle származik az – az avatatlanok számára kissé furcsa és a biokémiai nomenklatura-bizottságokat az örületbe kergető – nevezéktan, amely mára kiirthatatlanul elterjedt. Nyilván a nem molekuláris biológusok is hallották már, ahogy a bennfentesek dobálózhatnak a



Bam, Bep, Eco, Hind, Sac, Fok és más hasonló nevekkal, kérem, nézzék el, ha én is ezt fogom használni, ezek a nevek egyszerűen az enzim forrását jelölik, a baktérium latin nevének rövidítése, amelyből az enzimet izolálták.

Ezen enzimcsoportok egyik tagja tehát a restrikciós endonukleáz enzim (R), amely a DNS egy 4-8 bázispár hosszúságú, többnyire szimmetrikus szekvenciaelemét nagy pontossággal felismeri, és a felismerő szekvencián belül, vagy annak közvetlen közelében, pontosan meghatározott módon, endonukleolitikusan elhasítja. Az enzimcsoport másik tagja a modifikációs metiláz vagy DNS metiltranszferáz (M), amely ugyanazt a szekvenciaelemet ismeri fel, és arra mindkét szálon egy-egy metilcsoportot visz. Az így metilált DNS-t viszont a restrikciós endonukleáz már nem képes elhasítani.

Mint már említettem, mi a hetvenes évek első felében kezdtünk e területtel foglalkozni, ekkor már az irodalomban 5-6 különböző, II. típusú RM enzimcsoportot jellemeztek, feltételezhető volt, hogy létezik még sok-sok eltérő specifitás is, és ismert volt ezen enzimek óriási lehetősége a DNS méretre szabdalásában, az akkor születő rekombináns DNS-technológiában. Kereskedelmi szempontból még az ismert enzimek sem voltak hozzáférhetők. Nyilvánvaló volt: minél több különböző specifitású restrikciós enzimmel rendelkezik egy laboratórium, annál sokoldalúbb, jobb lehetőségei vannak a génmanipulációs kutatásban. Ebből kiindulva adtam azt a feladatot új munkatársamnak, Kiss Antalnak, hogy nézze meg: tartalmaz-e restrikciós endonukleázt a szomszéd Genetikai Intézetben behatóan vizsgált *Rhizobium meliloti* baktérium.

Ez a keresés ugyan eredménytelen volt, de egy szerencsés véletlen, illetve – mivel Pasteurtól tudjuk, hogy a véletlen csak a felkészült és jó szemű kutatót segíti – Kiss Antal alaposága és szívóssága egy a vizsgált kultúrákat szennyező baktériumban, amelyet a néhai Ivanovics György azonosított *Bacillus sphaericus*-ként, megtalált és felfedezett egy új enzimet, a *Bsp*RI restrikciós endonukleázt (1). Az enzim specifitásban ugyan megegyezett egy akkor már ismert enzimmel, a *Hae*III-mal, de több igen előnyös tulajdonsággal rendelkezett, rendkívül stabil volt, szinte agyon sem lehetett verni, és szokatlanul nagy mennyiségben fordult elő a baktériumban, így igen könnyű volt a tisztítása. Az enzimet Koncz Csaba homogenitással tisztította és alaposan jellemezte, párjával, a *Bsp* metilázsal együtt (2). Az e munkában szerzett tapasztalatokra támaszkodva csoportunkban ekkor elkezdtük a már ismert ilyen típusú enzimek egyre növekvő számának házilagos preparálását, részben saját munkánk segítségével, részben kereskedelmi célból. E gyakorlati rutinmunka során a későbbiekben még néhány új enzimet fedeztünk fel, így *Brevibacterium epidermidis*-ben *Bep*I enzimet (3) és *Bacillus cereus*-ban a teljesen egyedi specifitású, különleges tulajdonságokkal rendelkező *Bce*II enzimet (4), amelyeket Orosz András segít-



ségével jellemeztünk. Inkább mulatságos epizódként említhetem az úgynevezett X enzimet. Ezt jénai kollégánk, Manfred Hartmann izolálta – ugyancsak véletlenül, egy szennyező, ismeretlen baktériumtörzsből –, s én jellemeztem, határoztam meg a felismerő specifitást. Mikor az eredményt közölni akartuk, Hartmann szomorúan közölte, hogy a törzs kipusztult, nem sikerült újraéleszteni. A tiszta enzimet még évekig használtuk, és noha azóta az ismert restriktív enzimek száma közelíti a 3000-et, a különböző specifitások száma meghaladja a 200-at, az X enzim máig vár az újrafelfedezésre, ilyen specifitású enzimet senki más nem talált azóta sem.

A különböző restriktív endonukleázokkal végzett rutinmunka során egyre jobban kezdtek érdekelni ezek az enzimek, nemcsak mint eszközök a kutatómunkában, hanem mint a kutatás céljai is. Felvetettük, hogy érdemes volna vizsgálni ezen enzimek biológiai szerepét, az enzimrendszerek genetikai szerveződését, szintézisük szabályozását, szerkezetüket, nagyfokú specifitásuk szerkezeti alapjait, működésmódjukat.

Az akkor még új – a hetvenes évek végén járunk – génklónozási technika kínálta az első támadáspontot: célul tűztük ki az általunk felfedezett *Bsp*RI enzimpár géneinek klónozását. E cél elérésére Kis Antal rendkívül szellemes ötleten alapuló biológiai szelekciós módszert javasolt, amelyet Szomolányi Éva segítségével ki is próbáltunk, és felhasználásával sikerrel klónoztuk, először a *Bsp* modifikációs metilázt (5). A módszert nem kívánom itt részletesen ismertetni, de elmondom, hogy azóta mindenki, aki valaha restriktív-modifikációs enzimeket klónozott, ezt – az irodalomba „magyar trükk” néven bevonult – módszert alkalmazza, és valamennyi gyártó cég is ezzel a módszerrel klónozott gének segítségével termelteti a restriktív és modifikációs enzimeket. Ha akkor eszünkbe jut a szabadalmaztatás és meg is tudjuk valósítani, akkor ma sem a munkacsoportunk, sem mi nem küzdenénk anyagi gondokkal.

A gén klónozása után Pósfai György meghatározta a gén és következőképpen az általa kódolt enzim teljes szekvenciáját (6). Ezt az első példát azután sok más követte. Klónoztuk és szekvenáltuk a *Bsp*RI után a *Bsu*RI (8), *SPR* (7), *Eca*I (10), *Bep*I (9), *Sau*96I (11), *Kpn*I (12) metilázok géneit. Itt szeretném megjegyezni, hogy a „magyar trükk” a metilázok működésén alapul, direkt módon tehát csak azok klónozására alkalmas. Minthogy azonban mai ismereteink szerint minden restriktív endonukleáz-modifikációs metiláz enzimpár géneje kapcsolt, egymás mellett helyezkedik el a kromoszómán, ezért ha elég nagy DNS-fragmentumot klónozzunk, akkor a metilázra történő szelekcióval klónozható a kapcsolt nukleázgén is. Ezt a lehetőséget szintén Kiss Antal használta ki a világon elsőnek a *Bsu*RI endonukleázgén klónozásával (8). E génpár szekvenálását a Nobel-díjas Richard J. Roberts laboratóriumával kooperálva



végeztük el úgy, hogy Pósfai György Szegeden szekvenálta a metiláz, míg Kiss Antal Cold Spring Harborban a nukleáz. Hasonló technikával később egy másik enzim, illetve génpár, a *Sau96I* rendszer klónozását és teljes szekvenálását Szilák László végezte el itthon, csoportunkban (11).

Első metilázgén-szekvenciánk eredményei alapján felismertük a fehérjék közös szekvenciaelemeit. E felismerés eredményeinek kibontakoztatása évekkel később az SZBK Biofizikai Intézetének matematikusa, Pósfai János nevéhez fűződik, aki az általa kidolgozott új algoritmus alapján Roberts laboratóriumában megállapította a legkülönbözőbb felismerő szekvenciájú 5-citozin metilázok szerkezeti homológiájának törvényszerűségeit. Itt magyarázatképpen meg kell jegyezni, hogy a katalizált kémiai reakció, illetve a DNS-ben metilált akceptor természete szerint a II. típusú modifikációs metilázok három csoportba sorolhatók:

1. A citozint az 5. szénatomon metiláló enzimek (idetartozik az általunk tanulmányozott enzimek többsége).
2. A citozin 4. helyzetű aminocsoportját metiláló enzimek.
3. Az adenin 6. helyzetű aminocsoportját metiláló enzimek.

A két utóbbi csoportban található szekvenciaazonosságok jóval csekélyebbek és nehezebben felismerhetők, elrendezésük, sorrendjük is változó. Pósfai János az első csoportba tartozó enzimekben 10 közös, hasonló szekvenciamotívumot ismert fel, mindig azonos elrendezésben. A VIII. és IX. blokkok közötti hosszabb egyedi szekvencia az úgynevezett szekvencia-felismerő régió (TRD = target recognizing domain). Itt kell megjegyezni, hogy ismeretes ennek az enzimszámra egy érdekes altípusa, a multispecifikus metilázoké. Ezeknek többségét Thomas Trautner berlini munkacsoportja fedezte fel és tanulmányozta, ide tartozik az először általunk azonosított és szekvenált SPR metiláz is. A multispecifikus metilázok TRD régiója jóval hosszabb a monospecifikusokénál, és ebben a TRD régióban funkcionálisan és szerkezeti szempontból jól elkülöníthető az egyes specifikusokért felelős egyedi szekvencia-felismerő régiók.

Az elmúlt másfél évtized során klónozott és szekvenált metiláz és nukleáz génjeink segítségével még sok érdekes eredményt nyertünk. Így például a *BspRI* metiláz génjét Fehér Zsigmond bevitte élesztőbe, amelynek DNS-e természetes állapotban egyáltalán nem tartalmaz metilcsoportokat. Sikert ért el ebben a heterológ gazdasejtben az enzim működését és egyes élesztőgének szelektív metilálását (13).

Megfelelő vektorokkal túltermeltettük és homogenitásig tisztítottuk a klónozott enzimek többségét (12, 14, 15), néhányukat alaposan jellemeztük enzimológiai szempontból, megismerve több érdekes tulajdonságukat. Szilák László egy adenin-metiláz, az *EcaI* és az 5-citozin-metiláz *BspRI* enzimo-



lógiját, a katalizált reakció kinetikáját vizsgálta alaposan és hasonlította össze, ennek ismertetésétől itt eltekintek (15, 16).

Kiemelném azonban Pósfai György újszerű és meglepő megfigyelését, azt, hogy a metilázok képesek intermolekuláris komplementációra (17). Ez azt jelenti, hogy a molekula önmagában inaktív N-terminális és C-terminális fele mind *in vitro*, mind *in vivo* együttesen képes véghezvinni az enzímreakciót, anélkül, hogy kovalensen össze volnának kapcsolva. Ilyen komplementációt először Ullmann Ágnes mutatott ki 30 évvel ezelőtt a  $\beta$ -galaktozidáznál, ennek óriási jelentősége is lett a molekuláris biológiában, de azóta is nagyon kevés hasonló esetről tud az irodalom. Pósfai azt is kimutatta, hogy ez a komplementáció két nagymértékben homológ és azonos felismerő specifitású, de különböző fajokból származó enzim, a *Bsp*RI és *Bsu*RI között is működik. Érdekes adat, hogy holland kutatók felfedeztek egy metilázt, az *Aqu*I enzimet, amely természetes állapotában is két lánc hasonló jellegű komplementációjával működik.

Szilák László és Finta Csaba kimutatták, hogy a *Bsp*RI metiláz enzim képes önmagát is metilálni az aktív centrum ciszteinjén és kisebb mértékben még egy másik ciszteinen, és ezzel részleges öngyilkosságot elkövetni (18). Ennek a jelenségnek a biológiai szerepéről semmit sem tudunk, noha némi formai analógiát mutat az Ada  $O^6$ -metilguanin-DNS-metiltranszferáz működésével. Ennek az enzimnek normális funkciója az, hogy saját magát metilálja, és ezzel további működését megbénítja, tehát a szó szoros értelmében nem is biztos, hogy enzimnek tekintendő.

Természetesen az utóbbi másfél évtizedben, a mi első eredményeink megszületése óta, igen nagyszámú – több mint száz – II. típusú restrikciós-modifikációs enzim primér szekvenciája vált ismertté, ismerjük továbbá öt nukleáz (*Eco*RI, *Eco*RV, *Bam*HI, *Pvu*II, *Fok*I) és négy metiláz (*Hha*I, *Taq*I, *Pvu*II, *Hae*III) röntgendiffrakcióval megállapított teljes háromdimenziós szerkezetét is. Ennek alapján megfogalmazható néhány általános szabályszerűség:

1. Az azonos felismerő szekvenciájú metiláz, illetve nukleáz enzimpárok között semmiféle szerkezeti hasonlóság, homológia nincsen, alegységszerkezetük is különböző (a nukleázok dimerek a metilázok monomerek). Nyilvánvalóan teljesen más mechanizmussal, más kölcsönhatásokkal ismerik fel a megfelelő szekvenciákat.

2. Az ismert nukleázszekvenciákban általában nem ismerhető fel hasonlóság, még azonos DNS-felismerő szekvenciájú enzimek esetén sem. A térbeli szerkezetben azonban a *Bam*HI, illetve *Eco*RI endonukleázok, a különböző felismerő szekvencia és primér szerkezet ellenére sok hasonlóságot mutatnak. Ez a jelenség konvergens evolúcióra utalhat.



3. A metilázok között bizonyos szekvencia hasonlóságok vannak. Mint már erről szó esett, ezek elég kicsik az aminocsoportot metiláló két enzimtípusnál, viszont igen széles körűek az 5-citozin-metilázoknál. A metilázok közül elsőként egy 5-citozin-metiláz, a *HhaI* enzim teljes háromdimenziós szerkezete vált ismertté. Az adenin-metiláz *TaqI* szerkezete viszont, a kevésbé hasonló primer szerkezet ellenére, meglehetősen hasonlónak bizonyult. E hasonlóság fényében újrazivsgálva a primer szekvenciákat, kiderült, hogy kevésbé manifeszt formában az adenin és 4-citozin-metilázok szerkezetében is megtalálható a Pósfai János által a másik csoportban felismert 10 motívum közül 9, csak éppen a sorrendjük más, mintegy cirkulárisan permutált sorrendben vannak jelen.

A restrikciós-modifikációs enzimrendszerek szerkezetkutatása terén a legizgalmasabb felismerést a *HhaI* enzim térszerkezetének megismerése hozta 1994-ben.

A binér enzim-szubsztrát (AdoMet), illetve a ternér enzim-DNS-AdoMet komplex térbeli szerkezete körülbelül megfelel annak, ami a primer szekvenciahomológiák, enzimológiai kísérletek és irányított mutagenesis-vizsgálatok alapján bennünk kialakult az 5-metilcitozin-metilázokról. Az enzim-molekula két doménból áll, a nagyobb, katalitikus és kofaktorkötő domén, valamint a kisebb, DNS-felismerő domén. A DNS-felismerő doménban két glicingazdag felszíni hurok érintkezik a DNS nagy árkával a felismerő szekvenciában, és ez a két hurok a primer szekvencia által jósolt egyedi, TRD, azaz szekvencia-felismerő régióban van. Ebben a doménban van ezenkívül a Pósfai János által felismert konzervált motívumok közül a IX. is. Ez a motívum mintegy gerinc fogja össze a kis domén egészét. Az I. és X. motívumok a metildonor SAM (S-adenozil-metionin) megkötésében vesznek részt. A IV. és VI. motívumok (és kevésbé hangsúlyosan a VII. és VIII. motívumok is) tehetők felelőssé a katalitikus aktivitásért, a IV. motívumban van az a cisztein, amely az 5-metilcitozin-metilázok esetében bizonyítottan részt vesz a katalízis intermediérének képzésében, és amelyről a *BspRI* metiláz esetében megállapítottuk, hogy tartós kovalens kötéssel is metilálhat, ha nincs jelen a DNS szubsztrát. A VI. igen erősen konzervált motívum szerepe az, hogy megfelelően pozicionálja a katalitikus centrumot tartalmazó IV. motívumot.

Mindez egyáltalán nem meglepő. Meglepőnek az bizonyult, amikor kiderült, hogy mi történik az enzimreakció során. Ekkor ugyanis a kölcsönhatás révén nem egyszerűen meghajlik a DNS, amint pl. egyes nukleázreakcióknál történik, hanem a felismerő szekvenciában lévő, metilálendő citozin teljes egészében kifordul a kettősspirál-szerkezetből, mélyen behatolva az enzim „zseb”-ébe, miközben az enzim katalitikus centrumát tartalmazó IV. motívum



közel  $180^\circ$ -kal elfordulva hozza egymás közelébe az aktív ciszteint és a citozint. Eközben a citozin helyébe ideiglenesen behatol egy glutamin és egy szerin oldallánc az enzim molekulából. A DNS-szerkezetnek ez az extrém torzulása, egy bázis teljes kifordulása, teljesen új jelenség, ami meglepő módon még energiát sem igényel. Roberts egy elméleti cikkében megjósolta, hogy valószínűen más enzimekről is ki fog derülni, hogy hasonló módon működnek. Ez a predikció fényesen beigazolódott, az elmúlt héten jelent meg a *Nature*-ben az a közlemény, amely az uracil-DNS-glikoziláz enzimről mutatja ki, hogy hasonlóan működik, a DNS-szerkezetben a hibát jelentő uracil jelenlétét felismerve kötődik, és a kötődés során az uracil kifordul a láncból, míg az enzim két aminosava behatol a helyére. A kifordult bázist azután lehasítja az enzim. Érdekes, hogy míg a *HhaI* metilázban az enzim a DNS nagy árka felől támad, addig az uracil-DNS-glikozilázban ugyanez a mechanizmus a kis árokból támadó enzim segítségével valósul meg.

Sokat foglalkoztunk mi is és mások is azzal a problémával, hogy mik azok a strukturális tényezők, amelyek ezen enzimek igen nagyfokú szekvenciaspecifitását determinálják, és hogyan lehet ezt irányított módon megváltoztatni, azaz új specifikus enzimeket mesterségesen előállítani.

Először is érdemes kvantitatívan jellemezni, hogy mit jelent a specifitás. A nukleázok esetében egy hat bázispárból álló felismerőhely egyetlen bázispárjának megváltoztatása az enzim hasítási sebességét legalább egymilliószorosan csökkenti, de egyes esetekben ez a tényező akár  $10^9$  is lehet. A metilázok esetében ilyen pontos kvantitatív adatok nem állnak rendelkezésre, de a specifitás biztosan itt is igen nagyfokú.

A fentiekben nagyon vázlatosan ismertetett térszerkezeti kép alapján arra a következtetésre lehet jutni, hogy az enzimspecifitás megváltoztatásához a variábilis TRD régió és esetleg a IX. motívum megváltoztatása szükséges. Noha ezt biztosan csak két éve tudjuk, már jóval régebben ebből a hipotézisből kiindulva próbáltunk, mi is és más csoportok is, mutagenézissel, illetőleg chimaera enzimek létrehozásával, a TRD régió vagy annak egyes szakaszainak áthelyezésével új specifikus enzimeket létrehozni. A multispecifikus metilázoknál Trautner és munkatársai sikeresek voltak. Ezeknél az enzimeknél – feltehetően a rugalmasabb térszerkezetnek köszönhetően – a TRD régió belül az egyes specifikusokat determináló, jól definiált felismerő szakaszok szinte tetszés szerint helyezhetők át, távolíthatók el funkciójuk megőrzésével, illetve a többi specifikus determinánsok érintetlenül hagyásával. Így új specifikus kombinációk létrehozása megoldottnak tekinthető. Nem így van ez a monospecifikus enzimeknél, ahol sok éves próbálkozásaink irányított mutagenézissel, meghatározott szakaszok átültetésével, illetve tervezett chimaerák létrehozásával mind



sikertelennek bizonyultak. Első ízben Roberts laboratóriumában sikerült egy megváltozott specifitású chimaera létrehozása a *HhaI* és a *HpaII* enzimek között 1991-ben. Ezek a kísérletek is azt bizonyítják, hogy a specifitást a TRD régió és a IX. motívum determinálják. Mi az irányított, tervezett átalakítási kísérletek kudarca után újabban megpróbálkoztunk egy másik megközelítéssel, amely a véletlen mutagenézisen és szelekción alapul. Ezzel az elmúlt év során már biztató eredmények születtek. E kísérletek célja: a GGA/TCC specifitású *SinI* metiláz átalakítása a lazább specifitású, azaz több DNS-szekvenciát modifikáló GGNCC felismerő helyű *Sau96I* specifitássá. Ebből a célból Kiss Antal, Pósfai György és Zsurka Gábor beállítottak egy nagy hatékonyságú szelekciós módszert, véletlenszerűen mutagenizálták a *SinI* metilázgén egy kiválasztott szakaszát, majd a mutagenizált gént hordozó *E. coli* klónok között szelektáltak a *Sau96I* metiláló specifitás megjelenésére. Sikerült is ilyen klónokat találni, és ezek vizsgálata megerősítette, hogy valóban – ha csekély aktivitással is, de – megjelent az új specifitás, a mutánsok a *SinI* specifitás teljes megőrzése mellett képesek voltak metilálni a GGGCC, illetve GGCCC szekvenciákat is. A mutánsok szekvenciájának analízise azonban a várakozástól eltérő eredményeket adott, a specifitást megváltoztató mutációk nem a TRD régióban és nem is a IX. motívumban helyezkedtek el. Ez a munka természetesen nincs még lezárva, folytatjuk a további mutánsok keresését és vizsgálatát.

Mindezen eredmények azt látszanak igazolni – összhangban más kísérleti rendszereken nyert fehérje-engineering-tapasztalatokkal –, hogy az enzimspecifitás – egyes kivételes esetektől eltekintve, mint például a multispecifikus metilázok – még akkor is, ha lényegében az enzim egy rövid, jól definiált régiójával van determinálva, azaz a DNS megfelelő szekvenciájával csak ez a régió áll közvetlen kapcsolatban, általában számos egyéb kölcsönhatás által van befolyásolva. Ez azt jelenti tehát, hogy vagy más helyeken történő mutációkkal is megváltoztatható, vagy hiába cseréljük ki a determináló elemet, ez csak akkor vezet specifitásváltozáshoz, ha másutt is végrehajtunk változásokat.

Más szavakkal: hiába áll rendelkezésünkre a csodálatos manipulációs eszköztár, az evolúció hatékonyságával nem tudunk egyelőre versenyezni. Persze azért megpróbáljuk. Remélem, amikor valamelyik munkatársam fog itt állni, székfoglalót tartani, ő már több sikerről számolhat be ebben a versenyben. Én ugyan nem hiszem, hogy – egy nagy sikerű könyv címével szólva – a molekuláris biológus istent játszik, amikor ebben a versenyben részt vesz, de ilyen nagy szavak használata nélkül is izgalmas a kihívás, elég ahhoz, hogy feladatot adjon számunkra a jövőben is.

Előadásom végére érvén bocsássák meg, ha ismét magamat idézem. Levelező tagi székfoglalóm végén azt mondtam, hogy az ott elmondottak azt illusztr-



rálják, hogy egy tisztán alapkutatási probléma hogyan vezethet gyakorlati fontosságú, alkalmazott eredményekhez. Az imént ismertetett munkával a fordított utat jártuk be: egy gyakorlati-technikai szükséglet, amit részben a hazai szegénység tett igazán szükségletté, indított el egy olyan kutatási irányt, amelyben talán fontos alapkutatási, elméleti eredményeket sikerült elérnünk.

Mint a bevezetésben említettem, az itt elhangzottak igen sok kutató munkáját foglalják össze. Befejezésül hálás köszönetet szeretnék mondani mindazoknak, akik az elmúlt közel negyedszázadban ezen a témán dolgoztak az SZBK Biokémiai Intéztében az én munkacsoportomban, illetve az utóbbi években már elsősorban Kiss Antal irányítása alatt; továbbá mindazoknak, akikkel e munka egyes szakaszaiban együttműködtünk. A legfontosabb, legmelegebb köszönet és hála szavai azonban azt az embert illetik, aki már nincs közöttünk. Levelező tagi székfoglalómon még itt ült az első sorban szeretett mesterem, Straub F. Brunó. Akkor csak magánlevélben mondtam neki köszönetet, mert úgy éreztem, nyilvánosan ez hízelgésnek hatna, amit sosem szeretett. Most azonban – fájdalom – már nyugodtan kimondhatom, hogy mindazt, amit a pályámon elértem, elsősorban neki köszönhetem, ezt az előadást az ő emlékének ajánlom.

## Irodalom

1. Kiss, A., Sain, B., Csordás-Toth, É., Venetianer, P.: A new sequence-specific endonuclease (*Bsp*) from *Bacillus sphaericus*. *Gene*, 1 (1977) 323–329.
2. Koncz, C., Kiss, A., Venetianer, P.: Biochemical characterization of the restriction-modification system of *Bacillus sphaericus*. *Eur. J. Biochem.*, 89 (1978) 523–529.
3. Venetianer, P., Orosz, A.: *BepI* restriction endonuclease, a new isochisomer of *FnuDII*. *Nucleic Acids Res.*, 16 (1988) 350.
4. Venetianer, P., Orosz, A.: *BceFI*, a new Type IIS restriction endonuclease. *Nucleic Acids Res.*, 16 (1988) 3053–3060.
5. Szomolanyi, E., Kiss, A., Venetianer, P.: Cloning the modification methylase gene of *Bacillus sphaericus*R in *E. coli*. *Gene*, 10 (1980) 219–225.
6. Posfai, G., Kiss, A., Erdei, S., Posfai, J., Venetianer, P.: Structure of the *Bacillus sphaericus*R modification methylase gene. *J. Mol. Biol.*, 170 (1983) 597–610.
7. Posfai, G., Baldauf, F., Erdei, S., Posfai, J., Venetianer, P., Kiss, A.: Structure of the gene coding for the sequence-specific DNA methyltransferase of the *B. subtilis* phage SPR. *Nucleic Acids Res.*, 12 (1984) 9039–9049.
8. Kiss, A., Posfai, G., Keller, C. C., Venetianer, P., Roberts, R. J.: Nucleotide sequence of the *BsuRI* restriction-modification system. *Nucleic Acids Res.*, 13 (1985) 6403–6421.
9. Kupper, D., Zhou, J.-G., Venetianer, P., Kiss, A.: Cloning and structure of the *BepI* modification methylase. *Nucleic Acids Res.*, 17 (1989) 1077–1088.



10. Brenner, V., Venetianer, P., Kiss, A.: Cloning and nucleotide sequence of the gene encoding the *Eco*I DNA methyltransferase. *Nucleic Acids Res.*, 18 (1990) 355–359.
11. Szilák, L., Venetianer, P., Kiss, A.: Cloning and nucleotide sequence of the genes coding for the *Sau*96I restriction and modification enzymes. *Nucleic Acids Res.*, 18 (1990) 4659–4664.
12. Finta, C., Sulima, U., Venetianer, P., Kiss, A.: Purification of the *Kpn*I DNA methyltransferase and photolabeling of the enzyme with S-adenosyl-L-methionine. *Gene*, 164 (1995) 65–69.
13. Feher, Z., Kiss, A., Venetianer, P.: Expression of a bacterial modification methylase gene in yeast. *Nature*, 302 (1983) 266–268.
14. Posfai, G., Kiss, A., Venetianer, P.: Overproduction of the *Bacillus sphaericus*R modification methylase in *Escherichia coli*, and its purification to homogeneity. *Gene*, 50 (1986) 63–67.
15. Szilák, L., Venetianer, P., Kiss, A.: Purification and biochemical characterization of the *Eco*I DNA methyltransferase. *Eur. J. Biochem.*, 209 (1992) 391–397.
16. Szilák, L., Dér, A., Deák, F., Venetianer, P.: Kinetic characterization of the *Eco*I methyltransferase. *Eur. J. Biochem.*, 218 (1993) 727–733.
17. Posfai, G., Kim, S. C., Szilák, L., Kovacs, A., Venetianer, P.: Complementation by detached parts of GGCC-specific DNA methyltransferases. *Nucleic Acids Res.*, 19 (1991) 4843–4847.
18. Szilák, L., Finta, C., Patthy, A., Venetianer, P., Kiss, A.: Self-methylation of *Esp*RI DNA-methyltransferase. *Nucleic Acids Res.*, 22 (1994) 2876–2881.





Teplán István

az MTA rendes tagja

# ANTITUMOR AKTIVITÁSÚ PEPTIDEK

Daganatellenes peptidmolekulák kifejlesztése és vizsgálata.  
Remények – realitások

Elhangzott 1998. március 17-én

A hipotalamikus eredetű releasing hormonok felfedezése, izolálása, szerkezetigazolása, szintézise, amely az 1960-as évek végére, az 1970-es évek elejére tehető, és elsősorban A. V. Schally nevéhez fűződik, egy hatalmas, igen széles spektrumú kutatási területnek teremtette meg az alapjait. A releasing hormonok közül is kiemelkedő jelentőséggel bír a gonadotropin hormonok releasing hormonja, a GnRH:

## A humán GnRH szekvenciája

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

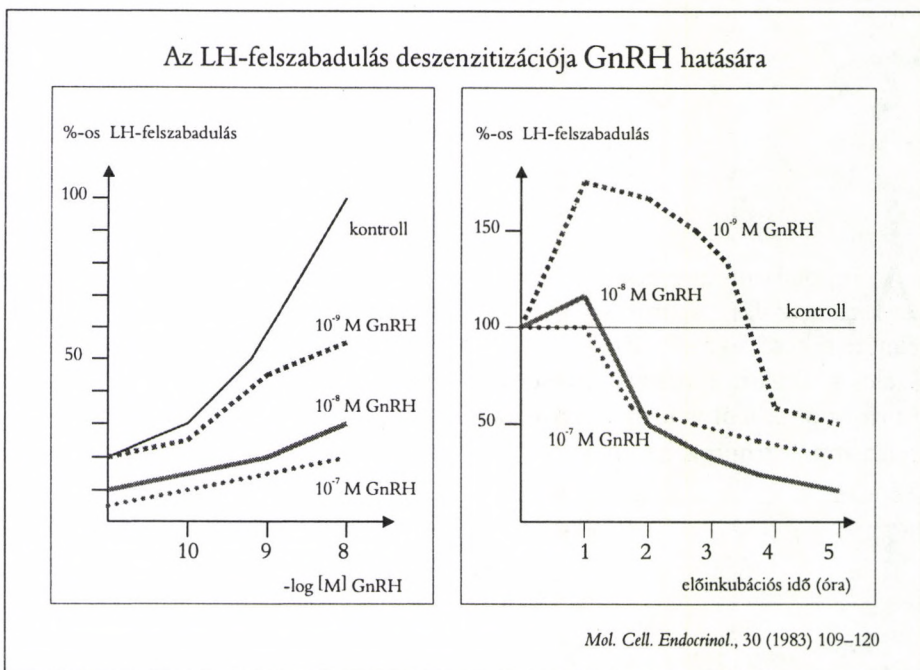
Glp-His-Trp-Ser-Tyr-Gly-Leu-Arg-Pro-Gly-NH<sub>2</sub>

1. ábra. A GnRH 10 aminosavból álló dekapeptid. A GnRH luteinizáló és follikulusz-stimuláló (LH és FSH) hormonokat szabadít fel, melyek szaporodás-biológiai folyamatokat szabályoznak

A GnRH agonista és antagonistá analógjaitól a szaporodásbiológia néhány nehezen kezelhető problémájának megoldását remélték és reméltük mi is. Ettől a reménytől indítva kezdődött el a világ számos laboratóriumában – így az általam vezetett laboratóriumban is – a minél jobb hatású agonista, ún. szuperaktív, illetve antagonistá, ún. inhibitor analógok előállítás, vizsgálata, aminek eredményeként százával készültek el a jobbnál jobb hormon-analógok.

Az általunk készített és vizsgált GnRH-agonistákról a levelező tagságomhoz kapcsolódó székhagyomány során számoltam be.

Ezeket a nagy hatékonyságú GnRH analógokat az emlősök és a haszonállatok terméketlenségével összefüggő problémák, anomáliák kezelése érdekében fejlesztettük ki. Fő szempontunk a klinikai vagy állatgyógyászati alkalmazásba történő bevezetés elősegítése volt.



2. ábra. A GnRH tartósan nagy koncentrációban adagolva kevesebb LH- és FSH-hormont szabadít fel, mint egyszeri adagolást követően kis koncentrációban

Természetesen a gyakorlati alkalmazást megelőzően tisztázni kellett azt a mechanizmust, amelyen keresztül ezek az anyagok kifejtik hatásukat.

Ennek során már az első megfigyelések az agyalapi mirigy receptorai deszenzitizációjának és down-regulációjának felfedezéséhez vezettek. Ugyanis



mind *in vitro*, mind *in vivo* kísérletekben azt a paradox jelenséget tapasztaltuk, hogy a GnRH nagyobb koncentrációban és tartósan adagolva kevesebb LH-hormont szabadít fel, mint kisebb koncentrációban. Ez a megfigyelésünk összhangban van azzal a korábbi felismeréssel, hogy a GnRH nem folyamatosan, hanem ritmikus, pulzatív módon szabadul fel a hipotalamuszból. Az így felszabaduló GnRH szabályozza a reprodukciós folyamatokat – többek között a gonadális szteroidogenezist és a gametogenezist – a hipofízisből felszabaduló gonadotrop hormonokon keresztül.

A GnRH-származékok másik csoportját, az antagonistá hatású analógok egész sorát mi elsősorban az ovuláció gátlására fejlesztettük ki. Ezek az előzőtől gyökeresen eltérő mechanizmus szerint fejtik ki hatásukat: nem növelik, hanem kifejezetten gátolják a hipofízis gonadotrop hormonjainak, az LH-nak és FSH-nak felszabadulását. Az alábbi táblázat mutatja be néhány általunk előállított, kiemelkedő antagonistá analóg szerkezetét és ovuláció-gátló hatását.

GnRH-inhibitorok szerkezete és antiovlációs hatása											OVULÁCIÓ- GÁTLÁS ( $\mu$ M)	Kód
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10			
Glp-	DPhe-	Phe-	Ser-	Tyr-	DPhe-	Leu-	Arg-	Pro-	Gly-NH <sub>2</sub>		1000	
	DPhe-	DTrp-			DPhe-						1000	
DGlp-	DCpa-	DTrp-			DPhe-						120	
AcDCpa-	DCpa-	DTrp-			DPhe-						50	
AcDCpa-	DCpa-	DTrp-			DPhe-				DAla-NH <sub>2</sub>		10	
AcDCpa-	DCpa-	DTrp-			DLys -				DAla-NH <sub>2</sub>		8	
AcDNal-	DCpa-	DTrp-			DArg-				DAla-NH <sub>2</sub>		1	
AcDTrp-	DCpa-	DTrp -			DLys-				DAla-NH <sub>2</sub>		2	MI-1544
AcDNal-	DCpa-	DTrp -			DCit-				DAla-NH <sub>2</sub>		3	SB-30
AcDNal-	DCpa-	DPal -			DCit-				DAla-NH <sub>2</sub>		-	SB-75

B. B. R. C., 100 (1981) 915., *Peptides*, 3 (1982) 969., *Endocrinology*, 110 (1982) 1445.,  
*Peptides*, 4 (1983) 149., B. B. R. C., 118 (1984) 351., *PNAS*, 85 (1988) 1637.

3. ábra. A GnRH-analógokkal gátolni lehet az LH- és FSH-hormonok felszabadulását; az agonista analógok tartós adagolása lecsökkenti a GnRH-receptorok számát; az antagonistá analógok gátolják a natív GnRH receptorkötődését

A GnRH-agonisták és -antagonisták eddig felderített gátló hatásának mechanizmusa röviden a következő: az agonista analógok tartós adagolása csökkenti a GnRH-receptorok számát – mintegy deszenzitizálja azokat –, aminek következtében csökken a gonadotropinok felszabadulása. Ezzel ellentétben az antagonisták analógok szintén erősen kötődnek a hipofízis receptoraihoz, és mint kompetitív inhibitorok gátolják a természetes eredetű GnRH kötődését, ezáltal az LH és FSH szekrécióját.

Az elmondottakból következik, hogy mind szuperaktív, mind antagonisták hatású analógokkal el lehet érni az ovuláció gátlását, hisz mindkét mechanizmus eredménye a szteroidszint csökkenéséhez vezet, aminek eredményeként az ovuláció nem következik be.

Azonban amíg az antagonisták a gonadműködés direkt és azonnali csökkenését idézik elő, addig az agonisták először a stimulus következtében egy gyors LH- és FSH-felszabadulást okoznak, és csak ezután jelentkezik a deszenzitizáció, aminek következménye a szteroidszekréció csökkenése.

Ezek a felismerések idézték elő azt a paradigmaváltást a GnRH-, illetve GnRH-analógok (agonisták–antagonisták) kutatásában, amely az 1980-as évek elejére tehető, és szintén Schally nevéhez fűződik. Ez az új elképzelés abból a logikából indul ki, hogy az ilyen mértékű szteroidszint-csökkenés hatással lehet a hormondependens tumorokra, és befolyásolhatja azok növekedését. Ezt az elképzelést már az első kísérleteink is igazolták.

A GnRH-analógok ilyen célra történő alkalmazása azt a lehetőséget is jelezte, hogy az irreverzibilis kasztrációt is magába foglaló eljárásokkal ellentétben a hormonszint ezekkel az anyagokkal történő átmeneti, drasztikus csökkentése visszafordítható folyamat, vagyis a kezelés befejeztével az ovárium működése helyreáll, és elkerülhető a műtéti trauma és a mellékhatások többsége. Mindezek és az adagolás viszonylagos egyszerűsége a GnRH-analógok széles körű alkalmazását ígérte.

Miután saját korábbi szintetikus munkáinkból adódóan kiemelkedő hatású GnRH-agonista és -antagonista analógokkal egyaránt rendelkezünk, kézenfekvőnek tűnt, hogy megvizsgáljuk ezek antitumor aktivitását. Ez az 1980-as évek végén azért volt időszerű, mert több nagy gyógyszergyár is – igaz, hogy nem magyar – kifejlesztett olyan szuperaktív és relatíve hosszan tartó hatású GnRH-analógokat, amelyek a hormonális kasztráció révén eredményesen használhatók voltak emlő-, ovárium- és prosztatatumorok kezelésére. Az általunk ezekkel egy időben kifejlesztett és szabadalmaztatott, hasonló biológiai aktivitással rendelkező szuperaktív GnRH-analógok – az OVURELIN-nek nevezett termékcsalád tagjai – sajnos a közismert hazai nehézségek és nehézségek miatt nem jutottak el a klinikai kipróbálásig. A következő ábra az általunk kifejlesztett molekulákat mutatja be.



**OVURELIN<sup>®</sup>**

**Glp - His - Trp - Ser - Tyr - D-Phe - Leu - Arg - Pro - NH - Et**

*Hung Pat., No.: 185 535*

**OVURELIN-C<sup>®</sup>**

**Glp - His - Trp - Ser - Tyr - D-Cpa - Leu - Arg - Pro - NH - Et**

*USA Pat., No. 4 552 864*

*4. ábra. Az OVURELIN hatóanyagot állatgyógyászati célra 1986 óta forgalmazza a Reanal Rt. Finomvegyszergyár*

Bár az OVURELIN néven szabadalmaztatott egyik analógunkat a Reanal Rt. Finomvegyszergyár állatgyógyászati készítményeként a mai napig forgalmazza, a humán gyógyszerfejlesztésre kijelölt analógjaink további kutatása néhány reményteljes eredmény után elakadt. Történt ez annak ellenére, hogy vizsgálataink egyértelműen bizonyították az OVURELIN jelentős tumorgátló hatását, amely megegyezett az ismert szuperaktív analógok hatásával a humán emlőtumor sejtvonalakon *in vitro* körülmények között. Tríciummal jelzett OVURELIN segítségével – egésztest-autoradiográfiás módszerrel – sikerült kimutatnunk azt is, hogy a jelzett OVURELIN jelentősen feldúsul a tumorszövetben, és hogy bizonyos tumorsejteken specifikus GnRH-kötőhelyek vannak, melyekhez mind az agonisták, mind az antagonisták kötődnek.

Ugyanakkor *in vivo* kísérletekben az Országos Onkológiai Intézetben dolgozó együttműködő partnereink a következő nagyon érdekes eredményre jutottak. Amíg az ismert és forgalomban lévő, hosszan tartó hatású agonista GnRH-analógok (pl. Zoladex, Decapeptyl) úgynevezett depokészítmény formájában xenograftos egereknél a kezdeti tumornövekedést követően drasztikusan csökkentették a tumorok súlyát, addig az OVURELIN és más agonista analógok – beleértve az előbbieket is – *nem depo* formában még napi kétszeri adagolás esetén se mutattak érdemleges tumorgátló hatást. Ez a felismerés irányította figyelmünket olyan megoldások keresése felé, amelyek a mi analóg-

jaink számára is biztosítják a tartósan magas koncentrációt. Sikertült azt is megállapítanunk, hogy mind a szteroid dependens, mind a szteroid independens tumoros sejtvonalak, valamint a xenograftok membránfrakciói GnRH-specifikus kötőhellyel rendelkeznek, és minden bizonnyal e kötőhelyen keresztül következik be a tumornövekedés gátlása. Ez utóbbi feltételezésünket az a kísérleti eredményünk is alátámasztja, hogy a tríciummal jelzett, agonista típusú OVURELIN ezekhez a tumorsejtekhez jelentős mértékben kötődik, amit a következő táblázat adatai is megerősítenek:

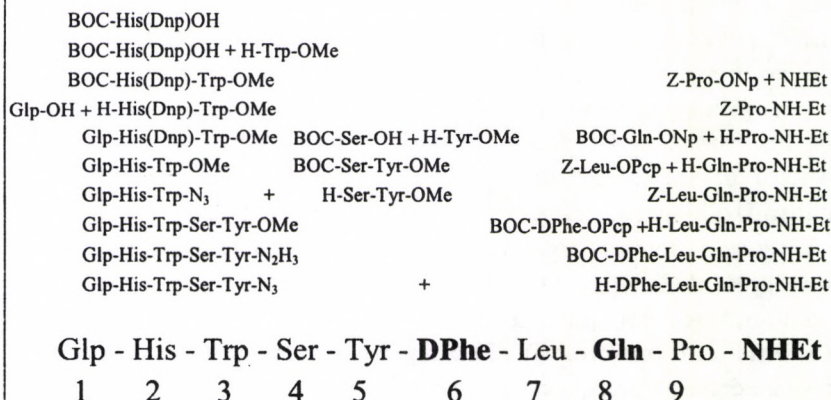
	Disszociációs konstans ( $K_d \times 10^{-9} M$ )	( $^3H$ )OVURELIN kötőkapacitás (pmol/mg protein)
MCF-7 sejtuszupenzió	36,48	3,95
MDA-MB-231 sejtuszupenzió	37,12	4,62
MCF-7 xenograft membránfrakció	30,22	3,56
MDA-MB-231 xenograft membránfrakció	30,12	4,23

*J. Steroid Biochem. Molec. Biol.*, 38, 119 (1996)

5. ábra. Bizonyos tumorsejteken specifikus kötőhelyek vannak, amelyekhez az agonista és az antagonisták típusú GnRH-analógok kötődnek. - Az OVURELIN jelentősen feldúsul ezekben a tumorszövetekben

Az OVURELIN mellett a másik, szintén tumorelles hatásra kifejlesztett GnRH-analógunk érdekes módon a csirke-GnRH egyik származéka volt. E fejlesztésnek az volt az előzménye, hogy az 1980-as évek közepén nagyszámú

### A FOLLIGÉN kémiai szintézise



6/a ábra



**GnRH:**

Glp - His - Trp - Ser - Tyr - Gly — Leu - Arg - Pro - Gly -NH<sub>2</sub>

**OVURELIN:**

Glp - His - Trp - Ser - Tyr - D-Phe — Leu - Arg - Pro - NH - Et

**BUSERELIN:**

Glp - His - Trp - Ser - Tyr - D-Ser(tBu) - Leu - Arg - Pro - NH - Et

**ZOLADEX:**

Glp - His - Trp - Ser - Tyr - D-Ser(tBu) - Leu - Arg - Pro - AzaGly -NH<sub>2</sub>

**FOLLIGÉN:**

Glp - His - Trp - Ser - Tyr - D-Phe — Leu - Gln - Pro - NH - Et

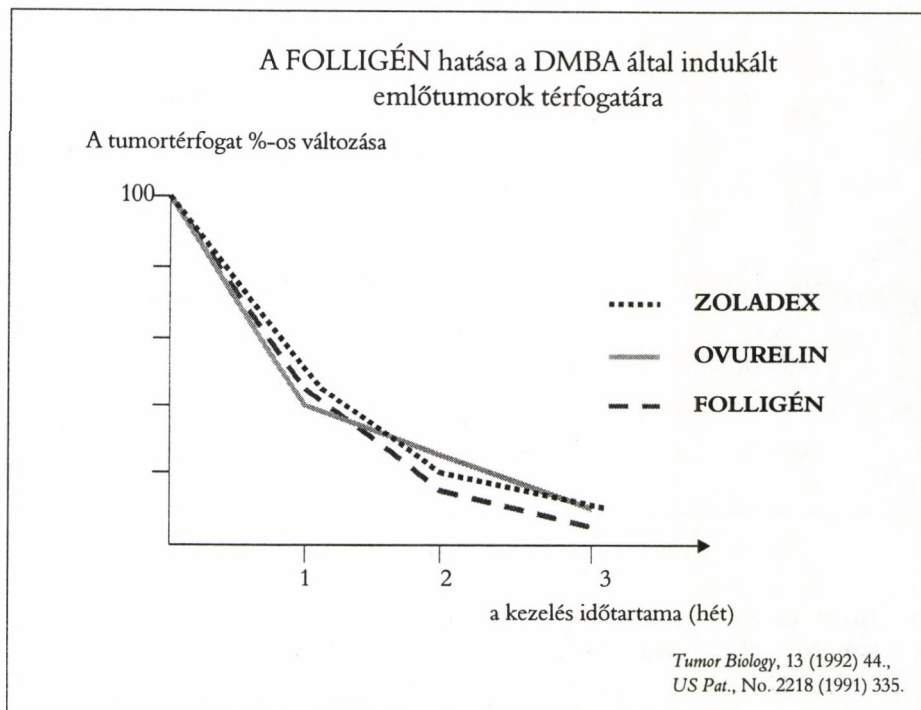
*6/b ábra*

új GnRH-analógot állítottunk elő, amelyek molekulatervezésében az ez idő tájt ismertté vált csirke- és lazac-GnRH-szerkezetét, valamint az emlős szuperaktív GnRH-analógok előállításánál bevált kombinációkat alkalmaztuk. Ezek alapján továbbfejlesztésre kiválasztott leghatékonyabb tumorgátló hatású GnRH-analógunkat FOLLIGÉN néven szabadalmaztattuk, amelynek a szerkezetét a 6. ábra mutatja be.

A FOLLIGÉN első vizsgálatai is már igen jelentős tumorgátló hatásról tanúskodtak. A 7. ábra két agonista analóg mellett a FOLLIGÉN *in vivo* tumor-térfogatra kifejtett gátló hatását tünteti fel.

A részletes vizsgálatok során azt találtuk, hogy a FOLLIGÉN patkányokban dimetil-benzantracén (DMBA) által indukált emlőtumorokon gyakorlatilag azonos mértékű tumorgátlást váltott ki, mint az ICI klinikai gyakorlatban lévő, ZOLADEX nevű készítménye: nevezetesen a tumor térfogatának 90–95%-os csökkenését. Azonban amíg ez utóbbi mellékhatásként hormonális kasztrációt és az ovárium működésének teljes gátlását eredményezte, addig a FOLLIGÉN-kezelés egyáltalán nem gátolta az ovariális működést, és nem okozott kémiai kasztrációt sem. Mindez a két molekula különböző hatásmechanizmusát jelzi, ami érthetően a különböző kémiai szerkezetből adódik.

A tumorgátlással párhuzamosan kezdtünk el foglalkozni az onkogén transzformációban meghatározó szerepet játszó tirozin-kináz enzim hatásmechanizmusának vizsgálatával, különböző peptidszubsztrátok, inhibitorok, ill. antigén determinánsok tervezésével és szintézisével. Ennek a témának a jelen-



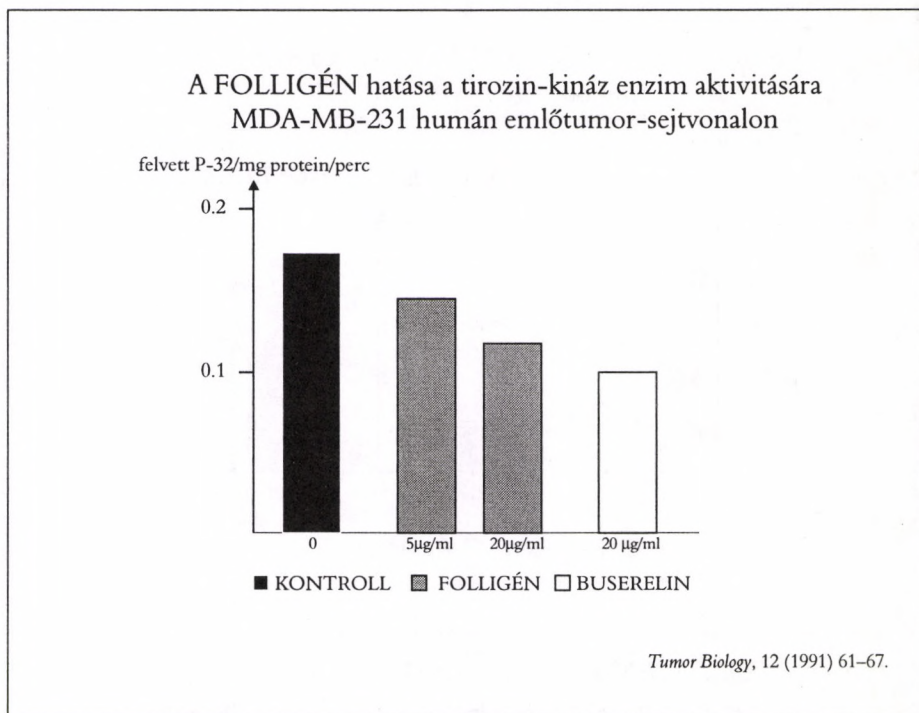
7. ábra. A FOLLIGÉN® nem gátolja az ovariális működést, nem okoz kémiai kasztrációt, jelentősen gátolja az emlőtumorok növekedését

tőségét az adja, hogy az eddig ismert onkogének közel fele tirozin-kináz enzim kódol, de emellett a növekedési faktor receptorok és az inzulin receptor is tirozin-kináz, vagyis a tirozin-kináz típusú enzim. Ezen molekulák alapvető szerepet játszanak a sejtosztódás regulációjában, és emiatt a gyógyszerkutatás fontos célmolekulái.

Antitumor peptidjeink hatásmechanizmusát vizsgálva fedeztük fel, hogy számos emlő-, prosztata- és vastagbél-tumor-sejtvonal rendelkezik jelentős tirozin-kináz-aktivitással, és ez az aktivitás peptidhormonokkal kedvező irányban befolyásolható. Így például a FOLLIGÉN és egy másik, forgalomban levő GnRH-agonista, a BUSERELIN is gátolja az MDA-MB-231 emlőtumor-sejtvonal tirozin-kináz-aktivitását.

Érdekesnek találtuk azonban, hogy ez a tirozin-kináz-gátló hatás nem feltétlenül járt együtt a tumorsejtek osztódásának gátlásával, ugyanis a FOLLIGÉN a tirozin-kináz-aktivitását csak kisebb mértékben csökkentette, mint a BUSERELIN (8. ábra), ugyanakkor viszont a lecsökkent GnRH-hatású



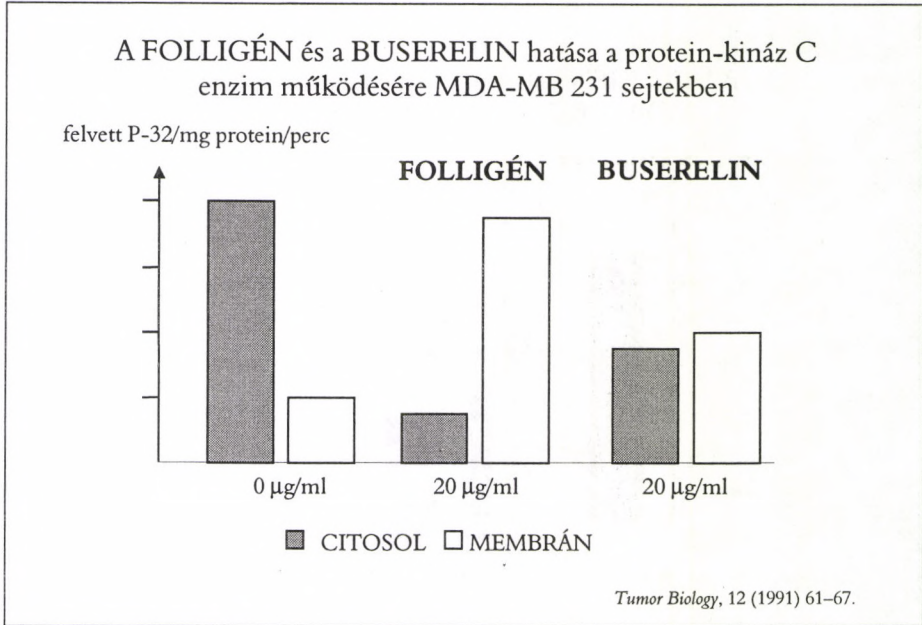


8. ábra. A FOLLIGÉN® és a BUSERELIN gátolja az MDA-MB-231 emlőtumor-sejtvonal tirozin-kináz-aktivitását

FOLLIGÉN a sejtosztódást hatékonyabban gátolta, mint a BUSERELIN. Emellett azt is kimutattuk, hogy a FOLLIGÉN és a BUSERELIN is hat a protein-kináz C enzim aktivitására. A totál enzimaktivitást ezek a hormonok ugyan nem változtatják meg, de jelentős mértékű enzimaktivitás-eltolódást okoznak a citoszolból a membránba.

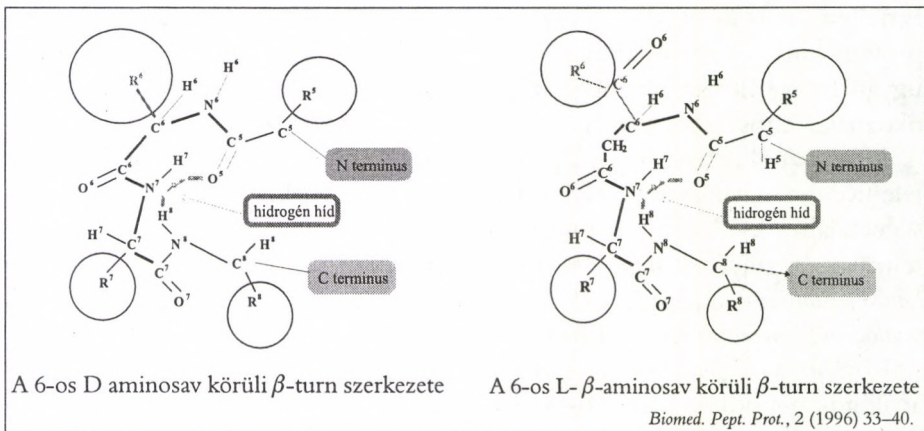
A 9. ábrából látható, hogy a protein-kináz C aktivitását a FOLLIGÉN jóval jelentősebb mértékben befolyásolta, mint a BUSERELIN, és hasonló különbséget találtunk a foszfolipid-átalakulás stimulálásában is. Eredményeink egyértelműen bizonyítani látszanak azt a tényt, hogy a FOLLIGÉN tumorelles hatásmechanizmusa jelentősen eltér a forgalomban levő és ismert szuperaktív GnRH-analógokétól nemcsak in vitro, hanem in vivo körülmények között is.

Korábbi vizsgálataink során azt tapasztaltuk, hogy a szuperaktív GnRH-analógok peptidláncában a 6-os helyzetű D-konfigurációjú aminosavak előnyösen helyettesíthetők olyan  $\beta$ -aszpartil szerkezeti résszel, melyek különböző típusú csoportokat tartalmaznak az  $\alpha$ -karboxil csoportjukon. Az említett



9. ábra. A FOLLIGÉN tumorelleses hatásának mechanizmusa jelentősen eltér az ismert szuperaktív GnRH-analógok hatásmechanizmusától

$\beta$ -aszpartil származékoknak és a D-aminosavaknak – például a BUSERELIN 6-os pozíciójában levő D-Ser(tBu)-csoportnak – igen hasonló térszerkezete van, mint az a 10. ábrán látható.



10. ábra



Ennek alapján várható volt, hogy a biológiai aktivitáshoz szükséges konformációt – nevezetesen egy  $\beta$ -turnt – ezzel a szerkezeti megoldással is lehet stabilizálni. E felismerésünk alapján magától adódott az a gondolat, hogy a FOLLIGÉN sajátos szerkezetéből fakadó előnyöket, vagyis a kis LH-release mellett jelentkező jelentős tumornövekedést gátló, valamint antiproliferációs hatást a  $\beta$ -aszpartil szubsztitúcióval kombinálva minimális endokrin, ugyanakkor tumorgátló hatású GnRH-analógot állítsunk elő. A így előállított, TH-332 jellel ellátott, tumorgátló vegyületünk képlete a 11. ábrán látható.

**EMLŐS GnRH:**

Glp-His-Trp-Ser-Tyr-Gly-Leu-Arg-Pro-Gly-NH<sub>2</sub>

**CSIRKE GnRH:**

Glp-His-Trp-Ser-Tyr-Gly-Leu-**Gln**-Pro-Gly-NH<sub>2</sub>

**TH-332:**

Glp-His-Trp-Ser-Tyr- $\beta$ **Asp(DEA)**-Leu-**Gln**-Pro-Gly-NH<sub>2</sub>

11. ábra. A TH-332-analóg hatékonyan gátolja a humán prosztata-tumorsejtek proliferációját, és apoptozist indukál

Ez az analógunk – a POTE Anatómiai Intézetében dolgozó együttműködő partnereink által elvégzett, ún. szuperfúziós *in vitro* kísérletekben az emlős-GnRH-hoz képest elhanyagolható mértékű endokrin aktivitást fejt ki, és *in vivo* kísérletekben sem befolyásolja a patkányok ovariális ciklusát. Másrészt viszont – mint már említettem – tumoros sejtvonalon a tríciummal jelzett analóggal végzett kísérleteink során specifikus GnRH-kötőhelyeket találtunk, ezért várható volt a TH-332 analóg antitumor aktivitása is. Az *in vitro* vizsgálatok során valóban ki is derült, hogy a TH-332 analóg gátolja a humán prosztata-tumorsejtek proliferációját, és jelentős mértékű apoptozist (programozott sejthalált) okoz.

Az agonista analógok mellett az antagonistá analógokra is kiterjesztettük vizsgálatainkat, amelyek – mint arról már korábban szó volt – a gonadotropin szekréciójának gátlásával azonnali kémiai kasztrációt és szteroidszint-csökkenést okoznak. Ennek keretében tanulmányoztuk a már ismertetett, nagy hatású ovulációgátló antagonistának, az MI-1544 jelű analógunknak a kötődési

sajátosságait, és azt tapasztaltuk, hogy a már szintén bemutatott GnRH agonista OVURELIN és az antagonistá MI-1544 egyformán kötődik az MCF-7 és MDA-MB-231 sejtvonalakhoz, és a két különböző GnRH-analóg ugyanahhoz a receptorhoz kötődik.

A TH-332 agonista, valamint az MI-1544 antagonistá analóggal szerzett tapasztalataink alapján az L- $\beta$ -aszpartil-( $\alpha$ -dietilamid) és a 8-glutamin-csoportokat az MI-1544 analóg szerkezetébe is beépítettük. Mivel időközben már ismertté vált a konjugátumok előnyös, megnövekedett tumorgátló hatása, ezért és a fenti szubsztitúciók miatt olyan analóg szintézisét kellett megtervezni és megvalósítani, amelyben a 5-Tyr aminosavat L-lizinnel helyettesítettük. Ezzel megteremtettük a hordozóhoz való kötés lehetőségét, és így jutottunk el az MI-1892 jelű analóghoz (12. ábra).

### **MI-1544:**

**Ac-DTrp-DCpa-DTrp-Ser-Tyr-DLys-Leu-Arg-Pro-DAla-NH<sub>2</sub>**

### **MI-1892:**

**Ac-DTrp-DCpa-DTrp-Ser-Lys-L- $\beta$ -Asp(DEA)-Leu- Gln-Pro-DAla-NH<sub>2</sub>**

*Biomed. Pept. Prot.*, 2 (1996) 33–40.

12. ábra. Az MI-1544 analóg gátolja az ovulációt és a daganatsejtek proliferációját

Az MI-1892 jelű analógunk egészen nagy dózisban – *in vitro* szuperfúziós vizsgálatokban – gátolja ugyan a humán GnRH LH-releasing hatását, azonban az *in vivo* kísérletekben az antagonisták hatásos dózisának húszszorosában sem gátolja az ovulációt. Ugyanakkor viszont ez a viszonylag gyenge antagonistá GnRH-analóg jelentős telepképződés- és proliferáció-gátló hatással rendelkezik.

*In vivo* kísérletekben pedig a szteroid independens xenograftot viselő ege-  
reknél naponta kétszeri kezelés mellett több mint 30%-os tumornövekedés-  
gátlást eredményezett (13. ábra).



**AZ MI-1892 ANALÓG TUMORGÁTLÓ HATÁSA**

	<b>Dózis</b>		
	1µM	30µM	50µM
MCF-7 telepképződés	8.0	34.0	38.2
MDA-MB-231 telepképződés	30.0	40.5	36.0
MCF-7 proliferációgátlás	21.7	26.8	35.0
MDA-MB-231 proliferációgátlás	18.0	20.5	35.0

*Biomed. Pept. Prot.*, 2 (1996) 33–40.

*J. Steroid Biochem. Molec. Biol.*, 34 (1991) 119–126.

*13. ábra. Az MI-1892 analóg nem gátolja az ovulációt, de jelentősen gátolja a tumorsejtek telepképződését és proliferációját*

Az amerikai Omahai Creighton Egyetem kutatóival együttműködve kezdtük el vizsgálni az orsóhalból izolált releasing hormon, a GnRH-III biológiai tulajdonságait, ennek az emlős-GnRH-tól eltérő szerkezetét mutatja a 14. ábra.

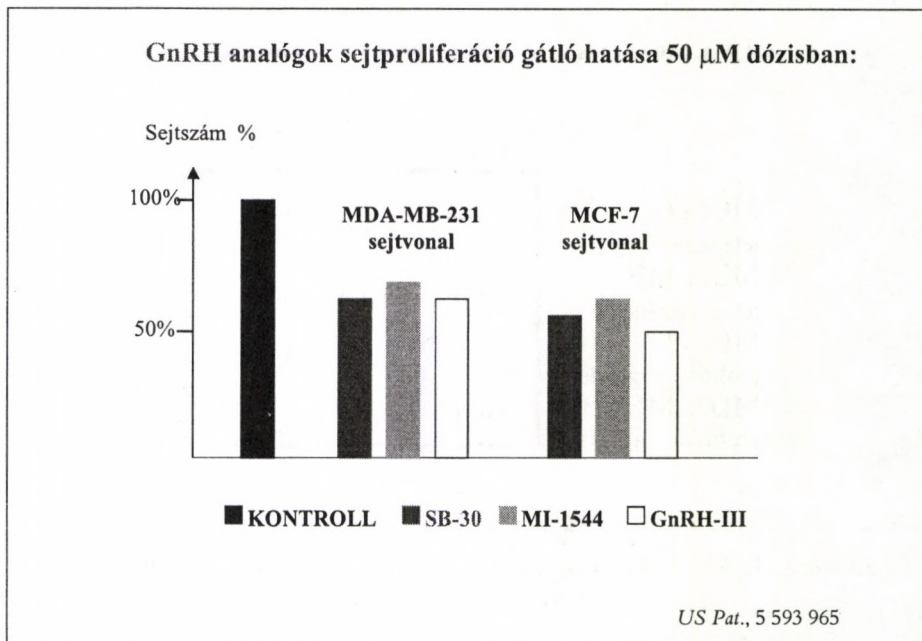
**HUMÁN GnRH:**

Glp-His-Trp-Ser-Tyr-Gly-Leu-Arg-Pro-Gly-NH<sub>2</sub>

**ORSÓHAL (LAMPREY) GnRH-III:**

Glp-His-Trp-Ser-His-Asp-Trp-Lys-Pro-Gly-NH<sub>2</sub>

*14. ábra. A GnRH-III nem gátolja az ovulációt, ugyanakkor jelentősen gátolja a tumorsejtek telepképződését és proliferációját*



15. ábra. A GnRH-III a legjobb antagonistá analógokkal azonos mértékben gátolja a humán emlőtumor sejtek telepképző képességét

A GnRH-III tartós és nagy dózisú kezelés esetén nem befolyásolja a patkányok ovariális ciklusát, és nem okoz kémiai kasztrációt sem, ugyanakkor a legjobb antagonistá analógokkal azonos mértékben gátolja a humán emlőtumor-sejtvonalak telepképződését, és jelentős mértékű sejtprolifерáció-gátló hatással is rendelkezik (15. ábra).

Ebből arra a következtetésre jutottunk, hogy a GnRH-III nagy hatású, természetes eredetű, szelektív tumorgátló hormon, amely felismerésünket közös magyar–amerikai szabadalommal védjük.

A GnRH-III jelentős tumorelles hatását azért tartottuk és tartjuk még ma is nagyon figyelemreméltónak, mert a GnRH-III csupa természetes L-aminosavból épül fel, ellentétben az antagonistá analógokkal, melyek esetenként 4–5, a természetben elő nem forduló D-aminosavat is tartalmaznak, melyek metabolizmusa még felderítetlen.

Mint a 14. ábrán látható volt, a GnRH-III szerkezete a humán GnRH szerkezetétől a lánc közepén lévő 4 aminosav-részben tér el, így talán jogosan feltételeztük, hogy a vegyület jelentős tumorelles aktivitása ehhez a szerkezeti részhez köthető, és ez az az ok, amiért e szekvenciárészletnek a jelentőségét tucatnyi analóg előállításával és vizsgálatával próbáltuk meg tisztázni. A natív



**GnRH analógok hatása  
tumorsejtek telepkepző képességére**

Analógok	sejtvonalak				
	MCF-7	MDA-MB-231	Ishikawa	PC3	LNCaP
1. Lys <sup>5</sup> -/GnRH-III	0	0	0	0	0
2. [Lys(N <sup>F</sup> -Fmoc)] <sup>5</sup> -/GnRH-III	-	-	-	-	-
3. Lys <sup>5</sup> ,cyclo[Asp <sup>6</sup> ,Lys <sup>8</sup> ]-/GnRH-III	+++	++	+	+	-
4. cyclo[Asp <sup>6</sup> ,Lys <sup>8</sup> ]-/GnRH-III	+++	++	+	+	-
5. Lys <sup>4</sup> ,[Lys(N <sup>F</sup> -Fmoc)] <sup>5</sup> -/GnRH-III	+++	+++	++	+	-
6. Lys <sup>4</sup> -/GnRH-III					
7. [Lys(N <sup>F</sup> -Ac)] <sup>4</sup> -/GnRH-III	+++	+++	+	+	-
8. Glu <sup>6</sup> -/GnRH-III	+++	++	0	+	-
9. Phe <sup>7</sup> -/GnRH-III	++	++	-	-	-
10. [Trp(For)] <sup>3,7</sup> , ΔPro <sup>9</sup> -/GnRH-III	+++	+++	++	+	-
11. /GnRH-III-(1-9)-EA	++	++	+	++	-
12. D-Ala <sup>10</sup> -/GnRH-III	0	+	0	0	-
13. Ac-D-Trp <sup>1</sup> , D-Ala <sup>10</sup> -/GnRH-III	+	0	+	-	+
14. [Trp(For)] <sup>3,7</sup> , [3H-Pro] <sup>9</sup> -/GnRH-III	-	-	-	-	-
15. Asu <sup>6</sup> -/GnRH-III[30]	+	-	-	-	++
16. ΔPro <sup>9</sup> -/GnRH-III	+++	+++	++	+	+++
/GnRH-III	+++	+++	+	++	+++
Decapeptyl	++	++	+	+	-

0: hatástalan (0-10%), +: gyenge (11-20%), ++: közepes (21-30%), +++: erős (>3096)

*J. Med. Chem.*, 40 (1997) 3353.

16. ábra. Megállapításaink: a 6-Asp és 8-Lys aminosavak között ionos kapcsolat van;  
a 7-Trp indolcsoportja hidrogénhíd-kötésben vesz részt;  
a 6-Glu analóg specifikus tumorgátló hatással rendelkezik; a C-terminális etilamid  
nem rontja le a biológiai hatást; a 6-os és 8-as aminosavak oldalláncainak ciklizálása  
enzimrezisztens analógot eredményezett

molekula szisztematikus változtatásával szintetizált analógjaink szerkezete és  
tumorelles hatása a 16. ábrán látható.

A táblázatban feltüntetett vegyületek szerkezetbiológiai hatásösszefüggésé-  
nek elemzése több érdekes felismeréshez vezetett, melyek részletes tárgyalásá-  
ba most nem mennék bele, csak néhány érdekességet emelnék ki:

– Megállapítottuk, hogy a 6-Asp és 8-Lys aminosavak között ionos kölcsön-  
hatás következtében egy „sóhid” alakul ki, amely stabilizálja a GnRH-III kon-

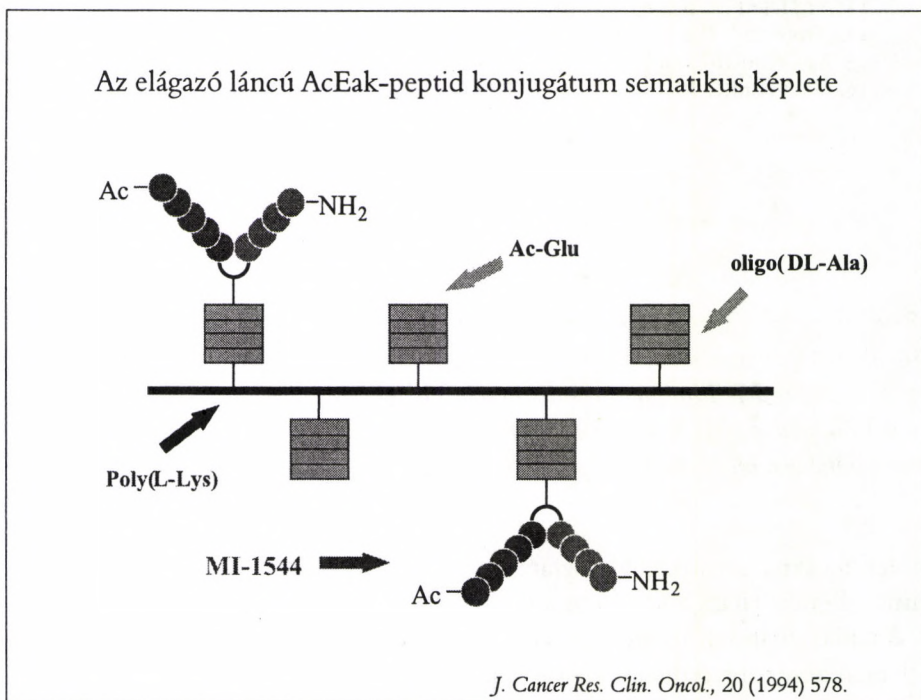
formációját, és ez, valamint a GnRH-III primer struktúrája idézheti elő a kiemelkedő antitumor-aktivitást.

– Megállapítottuk továbbá, hogy a 7-es helyzetű triptofán nem helyettesíthető más aminosavval, pl. fenil-alaninnal, mert feltehetően a triptofán indolcsoportja hidrogénhíd-kötés kialakításával hozzájárul a kötődéshez.

– Igen érdekesnek tartjuk, hogy az 6-Asp-analóghoz képest a 6-Glu-GnRH-III analóg emlőtumoros sejtvonalakon megtartotta a hatását, de más sejtvonalakon csökkent a tumorelles hatása, ily módon az emlőtumor-sejtvonalakra specifikus analóghoz jutottunk.

– Mivel a GnRH-analógok a szervezetben viszonylag gyorsan lebomlanak, ezért több, enzimatis hatásoknak ellenállóbb szerkezetű analógot állítottunk elő. Ezek közül kettő (4.,11. analóg) tumornövekedés gátló aktivitása megegyezett a natív GnRH-III-aktivitással.

Mint már korábban említettem, a GnRH-analógok csak tartósan magas hormonszint biztosítása mellett – például depóformulázás esetén – fejtenek ki jelentős tumorelles hatást. Az MI-1544 szerencsés analógnak bizonyult eb-



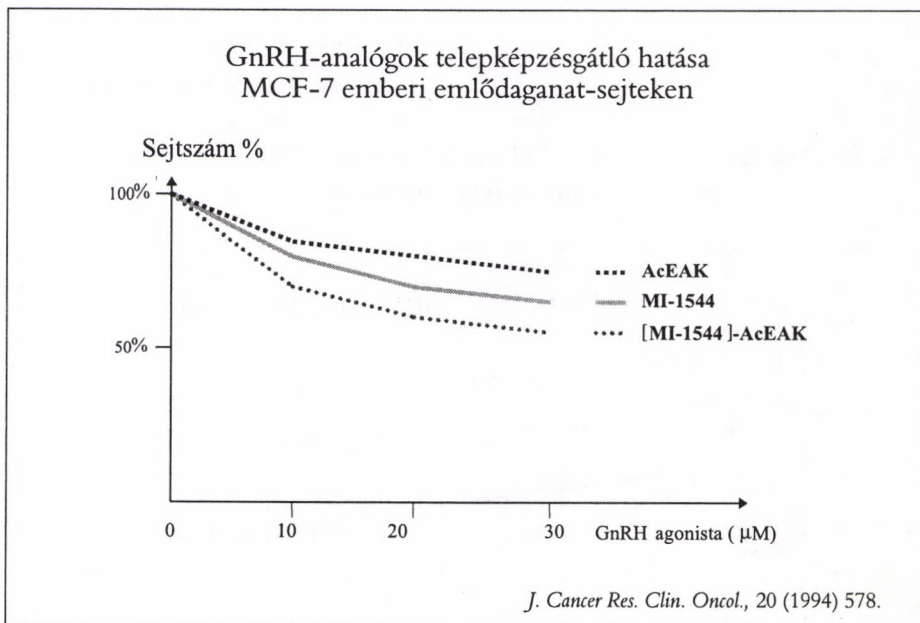
17. ábra. A biodegradábilis peptid-polimer konjugátum 2-3-szor nagyobb tumorgátló hatással rendelkezik, mint az MI-1544 peptid, illetve a polimer hordozó



ből a szempontból, mert a 6-os helyzetű lizin aminocsoportján és egy megfelelő, ún. spaceren keresztül polimer hordozóhoz köthető. Ettől a konjugátumtól azt vártuk, hogy a polimerről lassan leszakadva, tartósan magas koncentrációt, úgynevezett *long acting* hatást biztosít, mivel a konjugátum megnöveli a hormonmolekula enzimatisz stabilitását is.

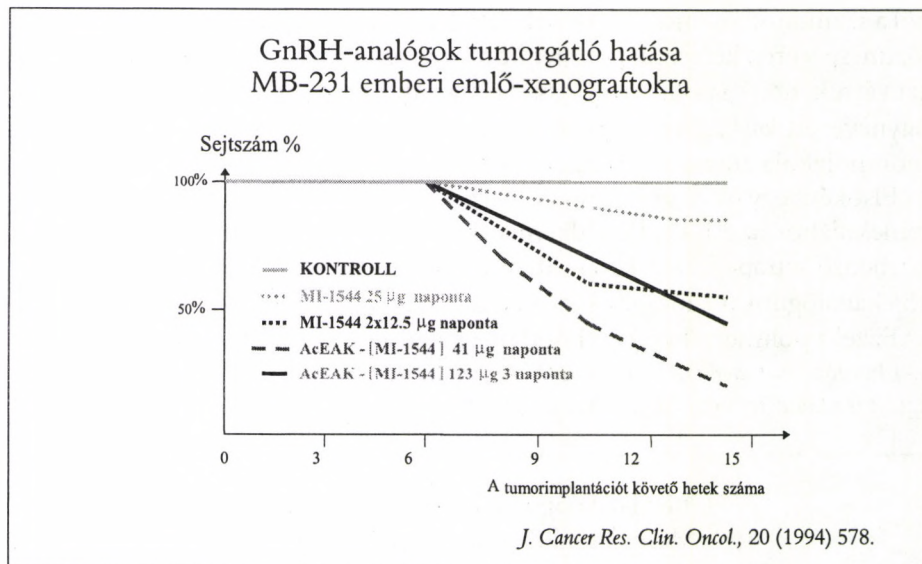
Elsőként egy biodegradábilis poli-lizin gerincű polipeptidhez mint hordozó molekulához az ELTE Peptidkémiai Kutatócsoportjával együttműködve egy közbenső tetrapeptiden keresztül a leghatékonyabb GnRH-antagonista MI-1544 analógunkat kapcsoltuk, amit a sematikus 17. ábra szemléltet.

Ezzel a polimerrel végzett kísérletek során azt tapasztaltuk, hogy míg a polimer hordozó önmagában csak kb. 15%-os, addig a konjugátum 45–50%-os tumorgátló hatást mutatott *in vitro*. Ezt illusztrálja a 18. ábra.

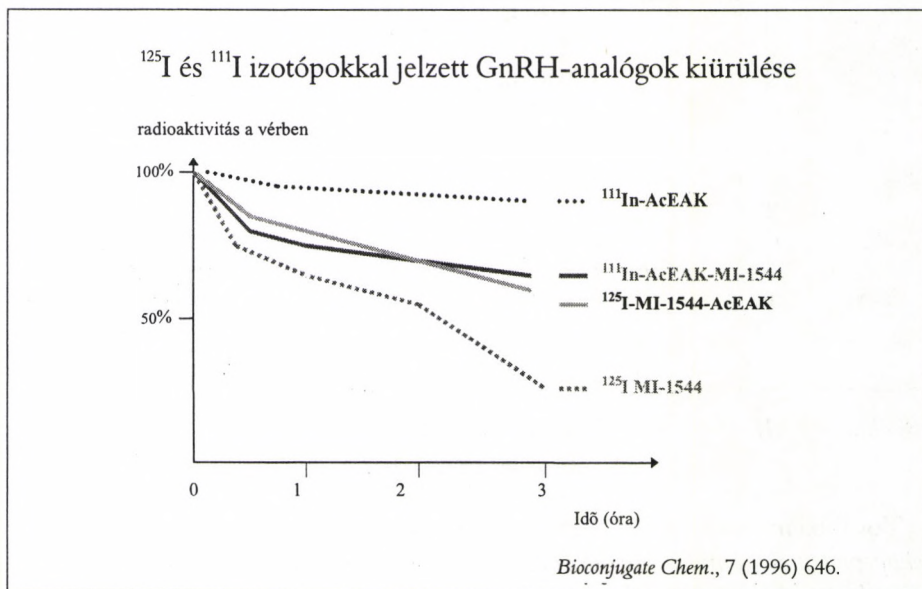


18. ábra. Az MI-1544 analóg polimer konjugátuma 50%-os telepképzésgátló hatással rendelkezik *in vitro*

Továbbá *in vivo* kísérletekben sikerült kimutatnunk, hogy míg az antagonistá decapeptid analóg önmagában napi kétszeri adagolás mellett is csak 30%-kal csökkentette a tumornövekedést, addig a konjugátum napi egyszeri adagolás mellett is 70%-ban – tehát igen jelentős mértékben – gátolta a tumortérfogat spontán növekedését. Ez látható a 19. ábrán.



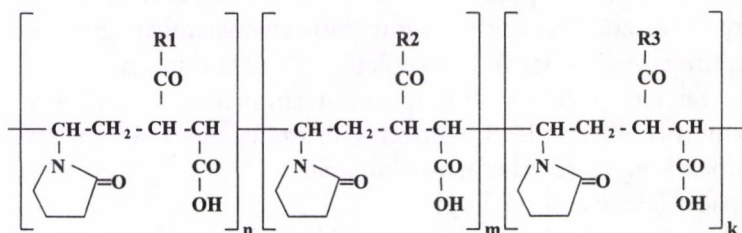
19. ábra. Az AcEAK-MI-1544 konjugátum 70%-ban gátolta a szteroid independens humán tumor növekedését in vivo



20. ábra. Az AcEAK-peptid-konjugátum háromszor lassabban ürül ki a szervezetből, mint a hormonanalóg



Nem biodegradabilis GnRH-analógok sematikus képlete



R1: OH, NH<sub>2</sub>, vagy NH(CH<sub>2</sub>)<sub>x</sub>CH<sub>3</sub>, X:0-7

R2: GFLG-OH

R3: GFLG-GnRH antagonist, MI-1544 vagy MI-1892

Hung. Pat., Number 212662

**MI-1892:**

Ac-DTrp-DCpa-DTrp-Ser-Lys-β-Asp(DEA)-Leu-Gln-Pro-DAla-NH<sub>2</sub>

**MI-1544:**

Ac-DTrp-DCpa-DTrp-Ser-Tyr-D-Lys-Leu-Arg-Pro-DAla-NH<sub>2</sub>

21. ábra

Míg a nem kezelt állatok a tumorimplantáció után 3-4 hónap múlva elhullottak, addig a konjugátummal kezelt állatok 25-30%-a tumormentessé vált, és élettartamuk megegyezett a tumorral nem kezelt állatokéval.

Megvizsgáltuk és összehasonlítottuk a 125-jóddal jelzett antagonist deka-peptid, az abból készített konjugátum, valamint a 111-indiummal jelzett hordozó és az azt tartalmazó konjugátum biodisztribúcióját. Azt találtuk, amit egyébként reméltünk is, hogy a konjugátum kb. háromszor lassabban ürül ki a kísérleti állat szervezetéből, mint a deka-peptid-analóg önmagában. Az eredményeket a 20. ábra szemlélteti.

Emellett jelentős eltérés mutatkozott a hormon és konjugátuma biodisztribúciójában is.

A poli-lizin gerincű hordozóval elért biztató eredmények alapján úgy véltük, hogy a molekula gyógyszerre fejlesztése érdekében nagy mennyiségben, gazdaságosan előállítható, vízdoldékonyabb polimer hordozót célszerű alkal-

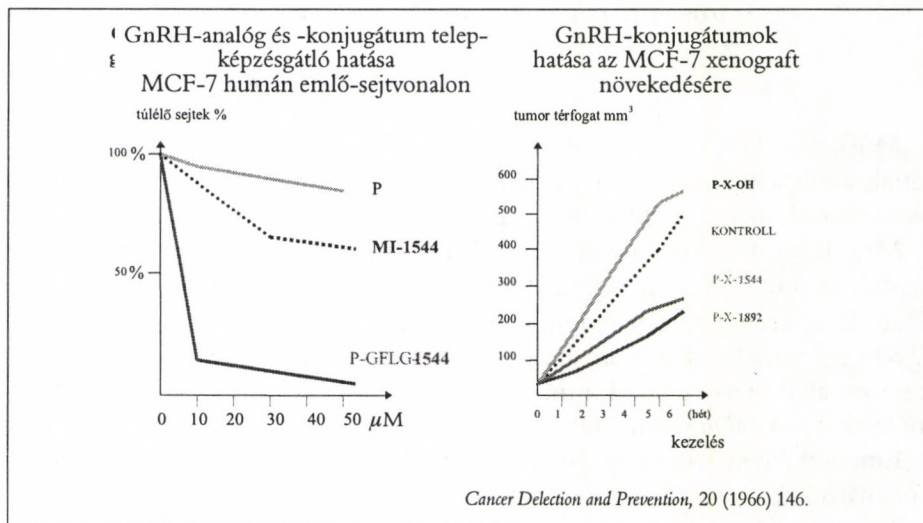
mazni a GnRH analógjainak konjugálására. Az MTA Központi Kémiai Kutatóintézetében dolgozó partnereink által korábban kifejlesztett vízdékony poli-vinil-pirrolidon-co-maleinsav polimer hordozó eleget tesz ezeknek a követelményeknek. A polimer hordozó molekula gerincéhez egy tetrapeptid spaceren keresztül kapcsoltuk a tumorgátló analógjainkat, így olyan vegyületet kaptunk, melyek sematikus képletét a 21. ábra mutatja.

Az ábrán látható R2 spacer csoport C-terminálisán levő glicin acilezi a peptidhormon analógból levő lizin részt, és ezáltal egy kovalens savamid-kötés biztosítja a konjugátum kémiai stabilitását.

A spacer lehetővé teszi, hogy:

- a hormonrész a hordozótól távolabb essék, és a konjugátum a hormon által irányítottan a receptorhoz tudjon kötődni;
- enzimatis hasítás következtében a hormon lehasadjon, és önálló peptidként is kifejthesse hatását.

A konjugátumokkal végzett *in vitro* kísérletek azt mutatták, hogy míg maguk a dekaeptid analógok (vagyis a hordozóhoz nem kapcsolt MI-1544 és -1892 analógok) a proliferációt csak 10–38%-ban, illetve a telepképződést 10–45%-ban gátolják a vizsgált dózisokban, addig – mint az a 22. ábrán látható – az ugyanakkora dózisban alkalmazott P-X-1544 és P-X-1892 jelű konjugátumok a proliferáció-gátlást 45–70%-ra, a telepképződés-gátlást pedig drámai mértékben, 95–100%-ra emelték meg, attól függően, melyik sejtvonalon mértük azokat.

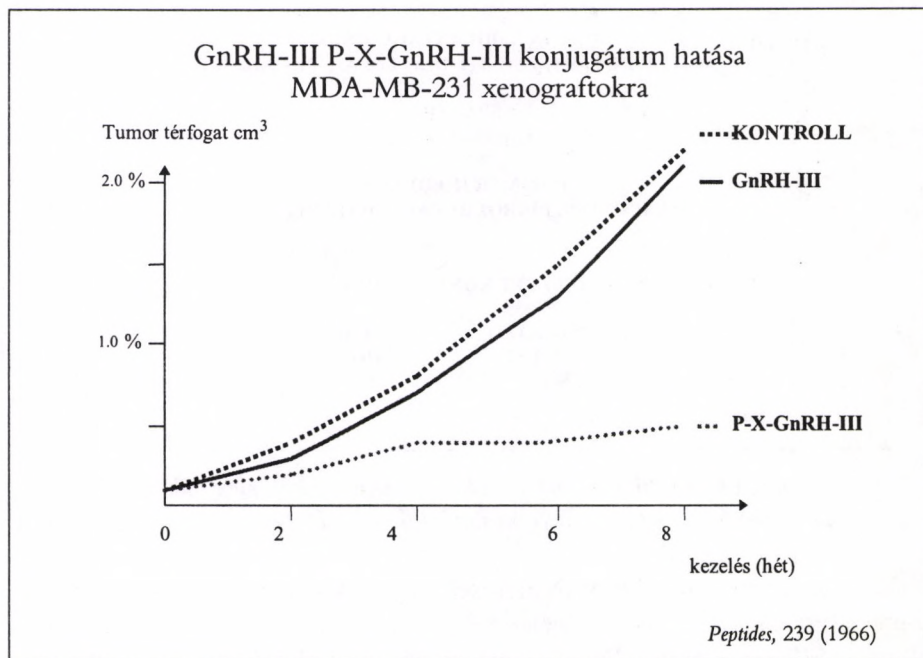


22. ábra. A konjugálás jelentősen megnövelte a peptidek proliferáció-gátló hatását *in vitro* és daganatgátló hatását *in vivo*



E konjugátumok *in vivo* 40–50%-kal csökkentették mind a szteroid dependens, mind az independens tumorok növekedését.

Vizsgálataink következő fázisában a legígéretesebb analógra, a GnRH-III-ra és konjugátumára koncentráltuk vizsgálatainkat. A natív GnRH-III konjugátuma *in vivo* a lassan növekvő MDA-MB-231 xenograftos egereknél a 9 hetes alkalmazás során igen jelentősen, 80%-ot is meghaladó mértékben csökkentette a tumornövekedést, sőt tumormentes állatokat is találtunk a kezelt állatok között. Az elmondottakat a 23. ábra mutatja be:

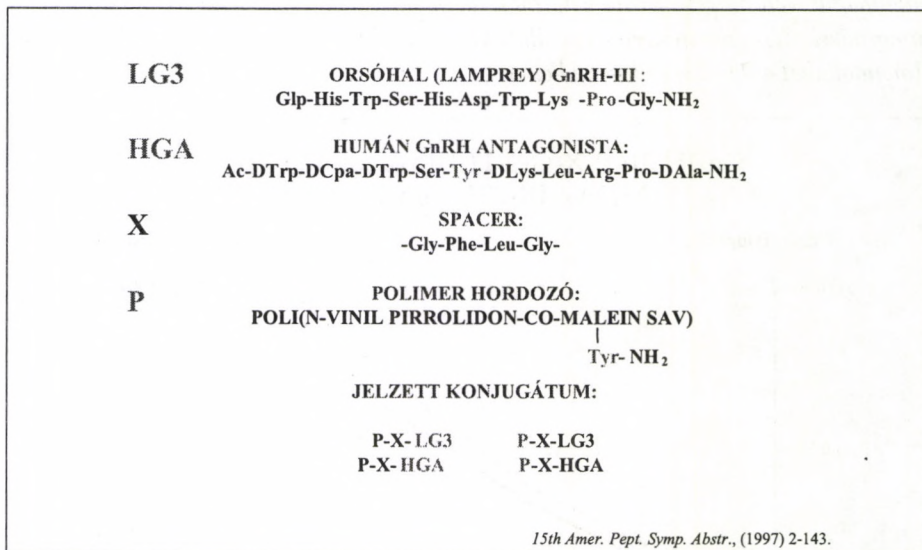


23. ábra. A P-X-GnRH-III konjugátum 80%-ot is meghaladó mértékben csökkenti a tumor növekedését; a hosszan tartó kezelés során a szteroid dependens és independens tumorsejtek GnRH-kötőhelyeinek száma nem csökkent

A gyorsabban növekvő MCF-7 xenograftos egereknél is a 6 hetes kezelés során kb. 70%-os tumornövekedés-gátlást tapasztaltunk.

Fontos megjegyezni, hogy ez a konjugátum egyáltalán nem csökkentette a tumorsejtek kötőhelyeinek számát, és fenntartotta a tumornövekedés-gátlást a hosszan tartó kezelés során. Ezt az támasztotta alá, hogy megvizsgáltuk maguknak a peptideknek és konjugátumaiknak a kötődését, a kötődés kinetikai paramétereit, illetve szöveti megoszlásaikat.

Erre a célra sikerrel tudtuk alkalmazni az 1970-es években általunk kidolgozott és alkalmazott ún. prekursoros szintetikus módszert a tríciummal specifikusan jelzett tumorelles peptidek előállítására. A tríciummal és radioaktív jódizotópokkal jelzett anyagok struktúráját és a radiojelzések helyét a 24. ábra mutatja.



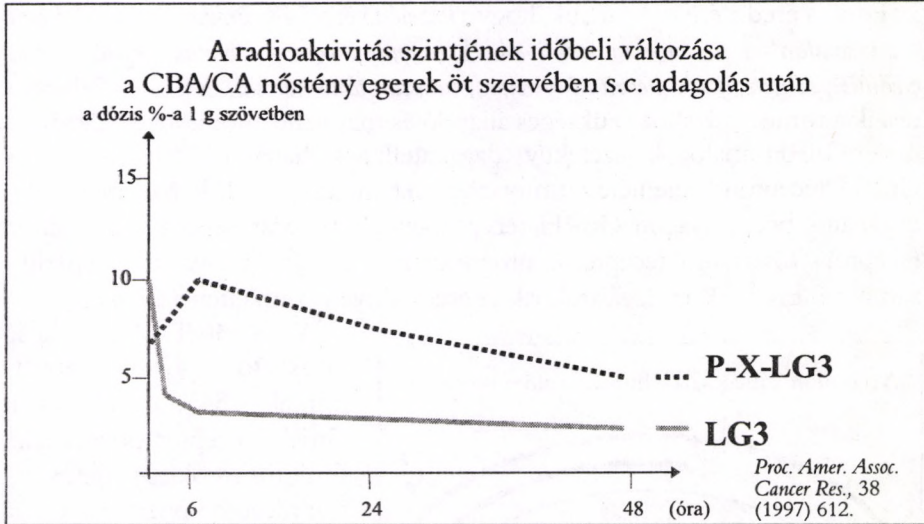
24. ábra. A konjugálás megnöveli a hormonreceptor komplex stabilitását; a tumorsejtek jelentős mértékben, specifikusan kötik a GnRH-polimer konjugátumokat

A velük végzett radioreceptor-mérések alapján azt is igazoltuk, hogy az általunk vizsgált tumorsejtvonalak és xenograftok a GnRH-konjugátumokat specifikusan és jelentős mértékben megkötik. Ezzel szemben magát a radiojelzett polimerhordozót egyáltalán nem kötik meg. Összehasonlítva a peptidhormonok és konjugátumaik specifikus kötődésének kinetikai paramétereit, megállapítottuk, hogy a konjugálás megnöveli a hormonanalóg-receptor komplex stabilitását, és a specifikus kötődéséért egyértelműen a GnRH-molekularész felelős.

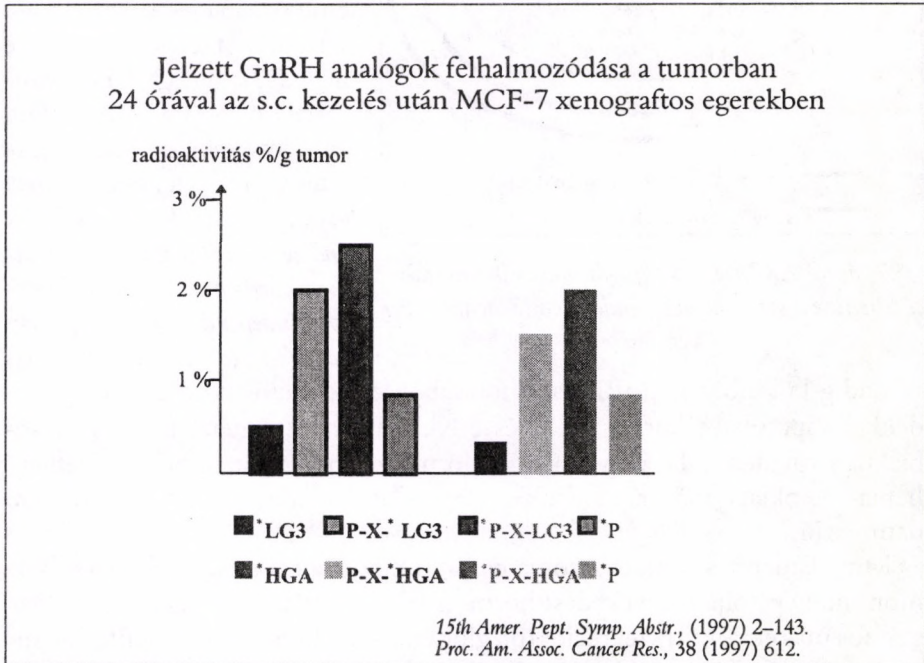
Tumormentes állatokban a radiojelzett anyagok szöveti megoszlásának vizsgálata azt mutatta, hogy a konjugálás megnövelte a különböző szervek szöveteiben a hormonanalógok biológiai felezési idejét (25. ábra).

Az előzőekben bemutatott eredményekkel összhangban a xenograftos állatoknál is a jelzett konjugátumoknak tumorokban mért radioaktív koncentrációja kb. ötszöröse volt annak az értéknek, amit a konjugátatlan szubsztanciával kezelt állatok tumorszövetében találtunk. Ezt mutatja a 26. ábra.





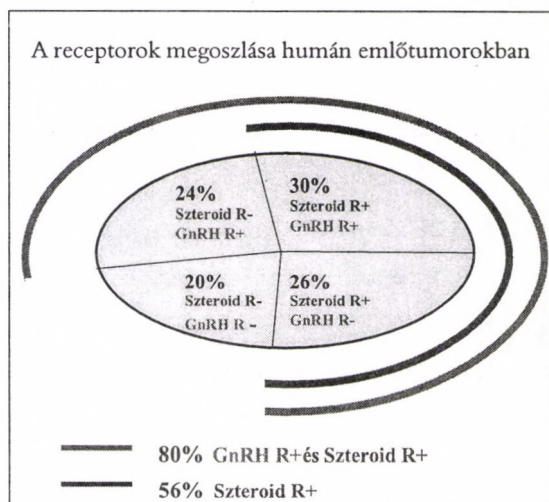
25. ábra. A konjugálás megnöveli a GnRH-III peptidhormon biológiai felezési idejét



26. ábra. A jelzett konjugátumok tumoros szövetben mért koncentrációja ötször magasabb, mint a nem konjugált peptideké

Fontos eredménynek tartjuk, hogy a kezelést követő 48. órában, a szervek közül – a vese után – a tumorok radioaktivitása bizonyult a legmagasabbnak, vagyis ezek az eredmények igazolják a készítmény retard, hosszan tartó hatását, és ezáltal lehetővé teszik a tumorgátláshoz szükséges állandó és magas hormonkoncentrációt.

A GnRH-analógok szelektív daganatellenes hatásának alapfeltétele a GnRH-receptorok jelenléte a tumorszövetekben. Az O. O. I.-ben primer emlő-daganatos beteganyagon GnRH-receptor-meghatározást végeztek, a szteroid receptor- (ösztadiol receptor és progreszteron receptor) vizsgálatokkal párhuzamosan. Ezeknek a vizsgálatoknak az eredményeit szemlélteti a 27. ábra.



27. ábra. A GnRH-konjugátumok alkalmasak lehetnek a szteroid independens emlődaganatok kezelésére

Az ábrából a következő olvasható ki: a tumorszövet-minták 54%-a bizonyult GnRH-receptor-pozitívnak. Emlőtumorok esetében szteroidreceptor-pozitivitást a minták 56%-ában tudtak kimutatni. Az összes vizsgált emlődaganatos szövet 24%-a szteroid receptorra nézve negatív, míg GnRH-receptorra nézve pozitív volt. Mindezekből az a következtetés vonható le, hogy a direkt daganatellenes hatású GnRH analógok konjugátumai alkalmasak lehetnek ezen utóbbi szteroid independens emlődaganatos betegek kezelésére is.

Eddig különböző, GnRH-hormonokból levezethető tumorelles peptid-ekkel kapcsolatos kutatásainkat és eredményeinket ismertettem. A továbbiakban röviden a 14 aminosavból álló natív szomatosztatinból levezethető hepta- és oktapeptid analógjainkkal kapcsolatos eredményeinket szeretném bemutatni.

Mint ismeretes, a natív szomatosztatin egy általános antiszekrécións hormon, mely gátolja a növekedési hormon felszabadulását, de ezen túlmenően számos más endokrin szekrécións (pl. glucagon-, insulin-, gastrin-), illetve sejtfunkcións is gátol és szabályoz. Az elmúlt évek során a szomatosztatin analógjainak különböző tumorsejtekre gyakorolt *in vitro* és *in vivo* gátló hatását is megfigyelték, azonban ezek antitumor ágensként történő alkalmazását – éppen a

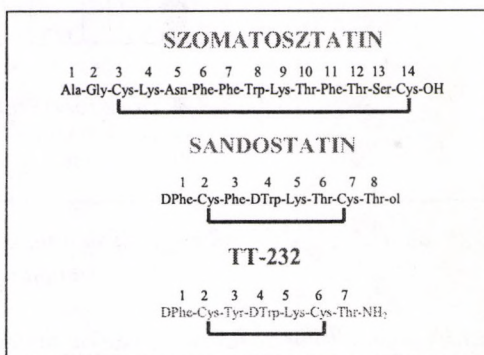


sokrétű biológiai hatása miatt – számos nemkívánatos mellékhatás akadályozta. Ma már ugyan két szomatostatin analóg is klinikai alkalmazásban van, mint antiszekréciós hormon és egyéb analógokat is eredményesen alkalmaznak bizonyos hormonfüggő tumorok kezelésében, azonban még mindig világszerte intenzív kutatások folynak a szelektív hatású tumorelles szomatostatin analógok kifejlesztésére.

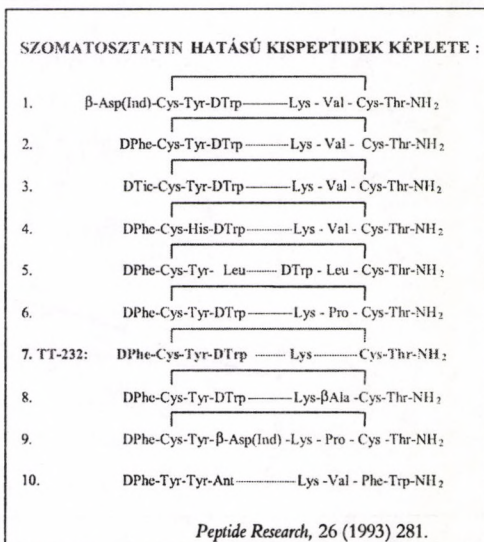
A mi érdeklődésünk akkor fordult a szomatostatin hatású kispeptidek előállítására felé, amikor ismeretessé vált, hogy a natív szomatostatin aktiválja a tirozin-foszfatazokat, és gátolja a tirozin-kináz-enzimet. Mi is számos új antitumor-hatású analógot állítottunk elő azzal a céllal, hogy a hormonhatás idejét, biológiai aktivitását és szelektivitását meg-növeljük. Alapvegyületnek a szomatostatin ismert ciklikus okta-peptidjét választottuk, és ezen a molekulán részben az irodalmi adatokra, részben saját eredményeinkre támaszkodva, szisztematikusan szubsztituens-cseréket hajtottunk végre. Ezeket az analógokat mutatja be a 28. ábra.

Az analógok kiválasztásánál a molekulák tirozin-kináz-gátló aktivitása és antiproliferációs hatása volt a fő szempontunk. Analógjaink egyike – a legjobb – egy hét aminosavból álló peptid, mely az irodalomból ismert analógokkal szemben nem hat, hanem öt aminosavrészből álló ciklust tartalmaz. Ezt a továbbiakban TT-232 jelű anyagnak neveztük el.

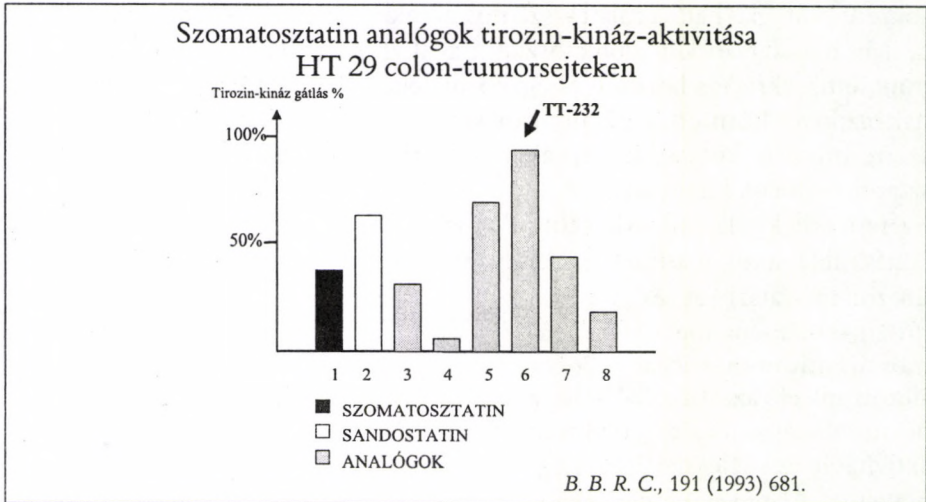
Ez a peptid a többiek közül jelentős tirozin-kináz- és sejtosztódást gátló hatása révén tűnt ki. 24 órás kezelés során a TT-232 erősen gátolta különböző humán vas-



28/a ábra

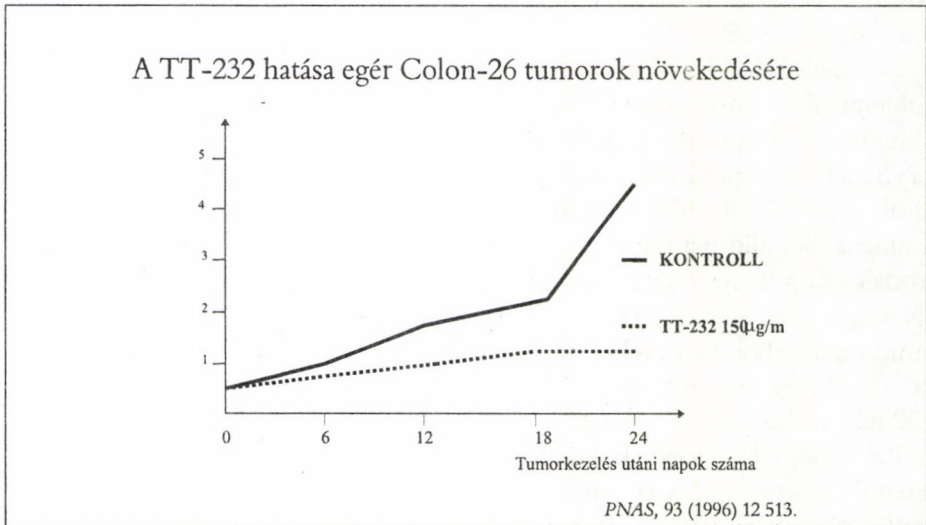


28/b ábra



29. ábra. A TT-232 erősen gátolja a humán vastagbél-tumorsejtek tirozin-kináz-aktivitását

tagbél-tumorsejtekben a tirozin-kináz-aktivitást, és ez a hatás jól korrelált a sejtosztódást gátló hatással, ugyanakkor sem in vitro, sem in vivo nem gátolta a növekedési hormon felszabadulását (29. ábra).



30. ábra. A TT-232 analóg tumorszelektív peptid gátolja a tumornövekedést és apoptozist indukál

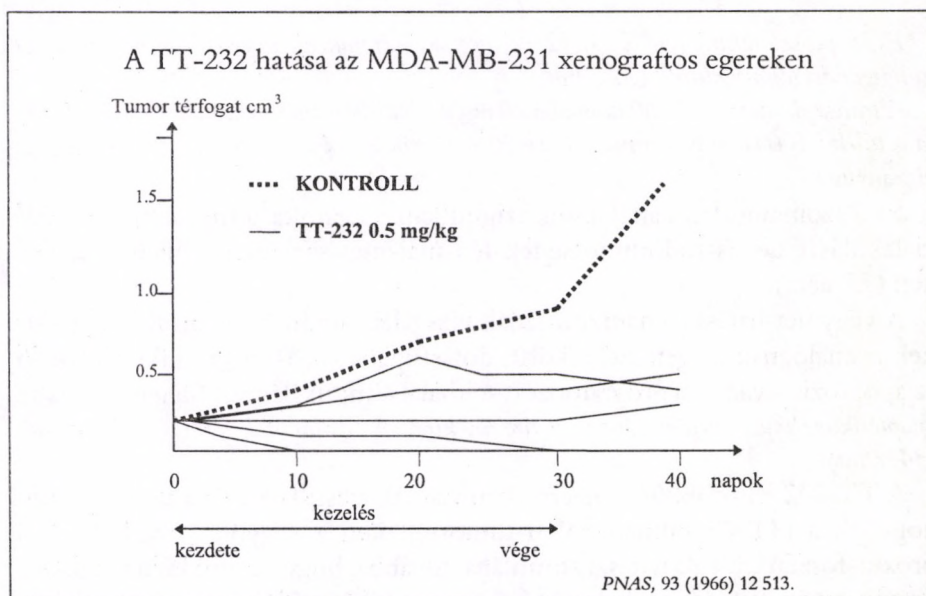


Kimutattuk továbbá, hogy a TT-232 nem kötődik a hipotalamuszban, a hipofízisben, illetve a cortexben, ezzel szemben jelentős mértékben kötődik a tumorsejtekhez, ami alátámasztja a szelektivitásra vonatkozó korábbi vizsgálatainkat. Kimutattuk azt is, hogy ez a tumorszelektív peptid *in vivo* különböző állatitumor-modelleken (S180 sarcoma, Colon26) jelentősen gátolja a tumor növekedését, és apoptozist indukál, melynek révén az állatok egy része tumormentessé vált (30. ábra).

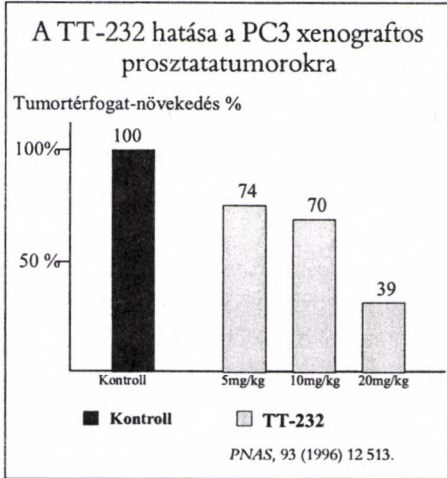
A gyógyszerre való fejlesztésre kiválasztott TT-232 jelű szomatosztatin analógunk erős antitumor-hatást mutatott számos további tumor-sejtvonalon (MCF-7 humán emlő-, PC3 humán prosztatata-, ill. SW 620 és HT 29 humán colon-tumorsejteken) *in vitro* kísérletben is. Ez az analóg a Cancer Research Institute mérései szerint 60 humán tumor-sejtvonalból 59-en hatásosnak bizonyult.

A TT-232 tumorgátló hatását MDA-MB-231 humán emlő xenograft modellen a 31. ábra szemlélteti.

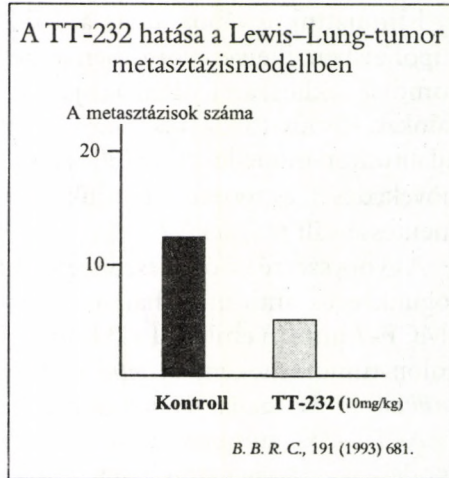
Látható, hogy a 30 napon át tartó kezelés során tumormentessé vált állatokat lehetett találni, viszont az egyes egerek TT-232-vel szembeni érzékenysége nagy különbségeket mutatott. A szomatosztatin analóggal szemben érzékenyebb xenograftos egerek esetében a tumor visszafejlődése, illetve a tumornövekedés 80%-os gátlása a kezelések beszüntetése után is megfigyelhető volt. A vegyület tumorgátló hatása a túlélés alapján is jelentős mértékű volt a kontrollcsoporttal szemben.



31. ábra. A TT-232 analóggal kezelt állatok egy része tumormentessé vált



32. ábra. A PC3 prosztatatumoron végzett TT-232-kezelés 60%-os tumorgátlást eredményezett, és a transzplantálás után 60 nappal a TT-232-vel a túlélés 100%-os volt



33. ábra. A TT-232 szignifikánsan gátolja a Lewis-tüdőtumorsejtek metasztázisát

PC3 prosztatatumoron TT-232-vel végzett háromhetes kezelés esetében 60%-os tumorgátlást tapasztaltunk (32. ábra).

A transzplantálás után 60 nappal a 20 mg/kg dózisban alkalmazott TT-232 hatására a túlélés 100%-os volt a mindössze 20%-os túlélést mutató kontroll állatcsoporthoz viszonyítva.

Ez a szomatosztatin analógunk szignifikánsan gátolta a tumor-metasztázis kialakulását Lewis-tüdőtumorsejtek lép-máj-metasztázismodelljében egereken (33. ábra).

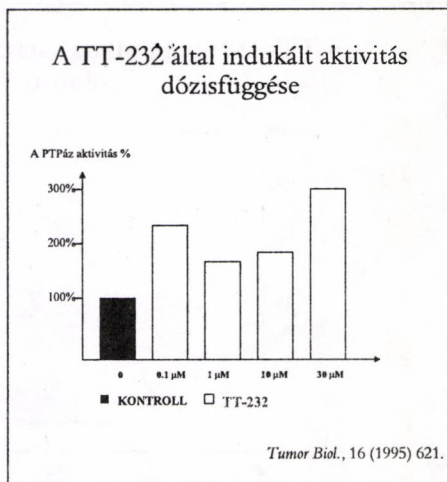
A vegyület hatásmechanizmusának vizsgálata során kimutattuk, hogy ennek az analógnak az igen széles körű, dózisfüggő és erős antiproliferatív hatása az apoptózis – vagyis a programozott sejthalál – indukálásával függ össze, és az apoptotikus hatás mediálásában a tirozin-kinázok gátlásának fontos szerepe van (34. ábra).

A TT-232 jeltovábbítási mechanizmusainak vizsgálata során az is kiderült, hogy pl. a HT-29 humán colon-tumorsejteken a vegyület rövid távon a tirozin-foszfátázok aktivitását stimulálja, továbbá, hogy hosszú távon gátolja a tirozin-kinázokat, és ez a hosszú távú tirozin-kináz-gátlás vezet apoptozishoz (35. ábra).





34. ábra. A TT-232 tumorgátló hatásában az apoptotikus hatás mediálásában a tirozin-kinázok gátlásának fontos szerepe van



35. ábra. A TT-232 rövid távon stimulálja a tirozin foszfatázok aktivitását, hosszú távon viszont a tirozin-kináz gátlás vezet apoptozishoz

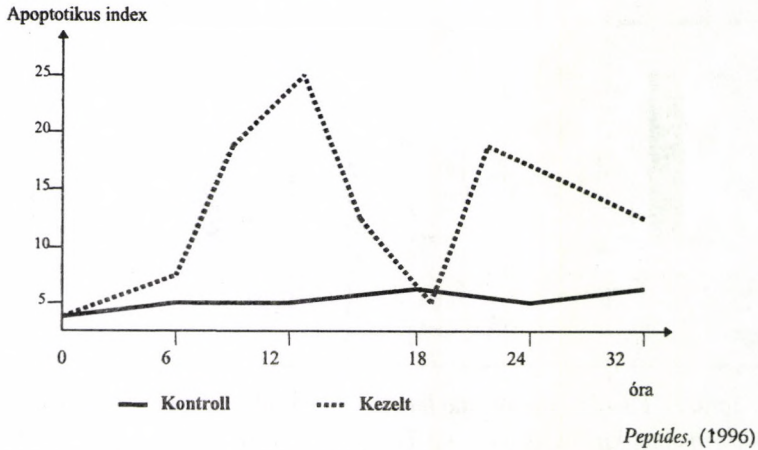
Az apoptozis-indukció időfüggését mutatja a 36. ábra.

A TT-232 erős apoptozist indukáló hatását számos humán tumor-sejtvonalon kimutattuk (37. ábra).

Jelenleg a TT-232 a preklinikai kipróbálás stádiumában van, és gyógyszerre válásához komoly reményeket fűzünk.

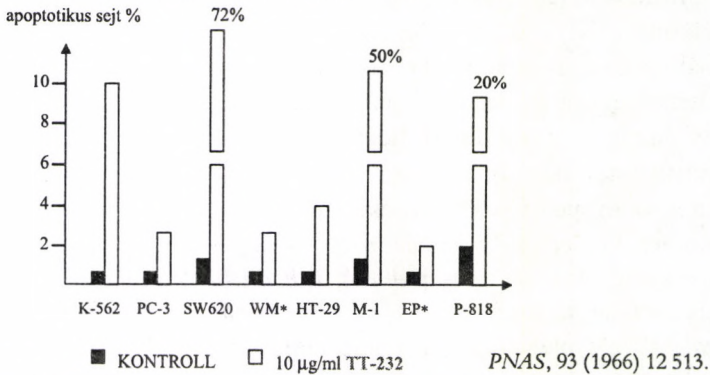
Összefoglalva e kutatások jelentőségét és a kutatócsoportunk által elért eredményeket, elmondható, hogy míg korábban a peptidhormon-származékok antitumor-hatását csak a természetes hormonhatás következményeként – mintegy nem specifikus – mellékhatásnak tekintették, addig az általunk kifejlesztett, hormonális hatás nélkül ható GnRH-analógok és az igen széles körű antitumor- és tirozin-kináz-gátló hatással rendelkező, de hormonhatást szintén nem mutató szomatostatín analógok alapvető áttörést jelentenek az antitumor peptidek kutatásában. Nekiünk sikerült először olyan újszerű peptidhormon-származékokat előállítanunk, melyek különböző in vitro és in vivo modelleken jelentős antitumor-aktivitással rendelkeznek, minden más endokrin hatás nélkül. Kimutattuk ugyanis, hogy az általunk előállított új peptidhormon-származékok nem az endokrin hatás közvetítésével fejtik ki in vivo antitumor-aktivitásukat. Ezek a peptidek nemcsak szelektíven gátolják bizonyos emlő-, ill. prosztata- és vastagbél-tumorsejtek osztódását, de megváltoztatják a jeltovábbítási mechanizmusait is, aminek eredményeként aktiválódik a programozott sejthalál (az apoptozis) mechanizmusa.

A TT-232 apoptotikus hatásának időfüggése HT-29 humán colon-tumorsejtekben



36. ábra. A TT-232 apoptozist indukáló hatása bifázikus

A TT-232 apoptozist indukáló hatása különböző sejtvonalakon a kezelést követően 24 óra múlva



37. ábra. A TT-232 erős apoptozist indukáló hatását számos humán tumorsejtvonalon kimutattuk

A teljesség kedvéért, de valóban csak nagyon röviden, a daganatok ellen használt gyógyszerekkel szemben kialakuló széles körű gyógyszer-rezisztencia, az ún. MDR (Multi Drug Resistance) gátlására kifejlesztett peptidjeinkről



is szeretnék egy villanásnyi képet adni, mivel ezek is nagy jelentőségűek lehetnek.

Ismert ugyanis, hogy a rákos sejtek nagy része előbb vagy utóbb rezisztenssé válik a leghatékonyabb rákellenes szerekekkel szemben is. Ennek a gyógyszerrezisztenciának oka elsősorban az a P-glikoproteinnek nevezett membránfehérje, mely igen aktívan megakadályozza az általában hidrofób gyógyszer-molekuláknak a sejtekbe való beáramlását. Sikerült megfigyelni és számos *in vitro* kísérleti modellen bizonyítani, hogy az apoláris csoportokban igen gazdag, poláris csoportot pedig egyáltalán nem tartalmazó kispeptidek kompetitív módon képesek gátolni a transzportfehérjének is nevezett P-glikoprotein okozta rezisztenciát. Néhány hatékony analógunk képletét és két jellemző paraméterét a 38. ábra mutatja.

	MDR1 GÁTLÓ VEGYÜLETEK	K <sub>m</sub> (nM)	T <sub>ret</sub> (min)
1.	[BOC-Pro-Glu(OH)] <sub>2</sub> -Lys-OMe	>50000	1.1
2.	(Z-Pro) <sub>2</sub> -Lys-OMe	1650	1.6
3.	[BOC-Pro-Pro-Glu(OBzl)] <sub>2</sub> -Lys-OMe	100	2.8
4.	[BOC-Pro-Glu(OBzl)] <sub>2</sub> -Lys-OMe	40-50	3.4
5.	(Boc-Glu(OBzl)) <sub>2</sub> -DAB-OMe	30-40	3.6
6.	(Boc-Glu(OBzl)) <sub>2</sub> -Lys-OMe	20-30	3.9
7.	Boc-Asp(OBzl)-Lys(Z)-OtBu	50	5.3
8.	[BOC-Asp(OBzl)-Glu(OBzl)] <sub>2</sub> -Lys-OMe	20-60	11.1
9.	FMOC-Glu[Lys(Z)OtBu] <sub>2</sub>	10-20	12.5

*Peptides, (1966) 234.*

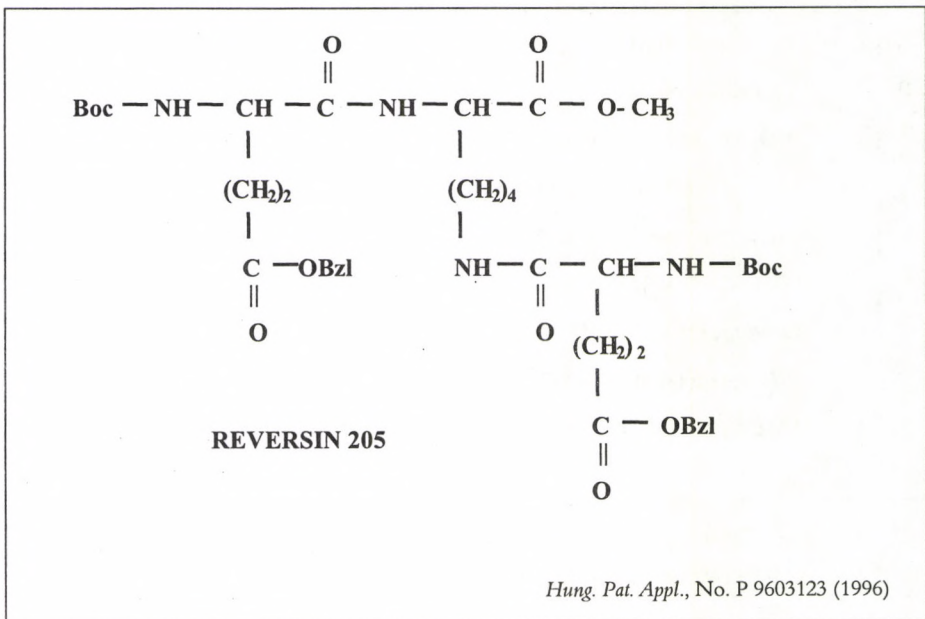
38. ábra. Az erősen hidrofób peptidek hatékonyan befolyásolják a tumorgátló gyógyszerek elleni rezisztenciát okozó MDR1 fehérje működését

Egyrészt szoros korrelációt lehet megfigyelni a fenti peptidjeink hidrofób jellegét tükröző HPLC-módszerrel meghatározott retenciós idő, valamint a peptidek biológiai hatását mutató ATPáz indukció aktivációs konstansai között, másrészt sikerült bebizonyítani, hogy ezek az erősen hidrofób peptidek hatékonyan gátolják a gyógyszerrezisztenciát okozó – a sejtmembránból kifelé irányuló – gyógyszer-transzportot. *In vitro* sejtmodelleken ugyanis sikerült

visszafordítani a rákos sejteknek eme rezisztens hatását, vagyis a peptidanalógjaink a P-glikoprotein – más néven MDR1 fehérje – működését gátolták, és ezáltal lehetővé vált a tumorelles gyógyszer, például a vinkrisztin bejuttatása az egyébként vinkrisztinre rezisztens tumoros sejtekbe. Ennek következtében aztán azok el is pusztultak. E kísérleteket az Országos Haematológiai és Vértranszfúziós Immunológiai Intézetrel, valamint kanadai kutatókkal együttműködve végeztük.

Két analógunk (a 6. és a 7. sorszámú analóg) hatásmechanizmusát több különböző módszerrel részletesen vizsgáltuk *in vitro* körülmények között, de ezeket az eredményeinket nincs idő részletesen ismertetni.

MDR-ellenes anyagaink *in vivo* vizsgálatai is elkezdődtek, és az előkísérletek szerint a peptidek önmagukban nem mutatkoztak toxikusnak, továbbá az NIH Cancer Research Institute kutatói által elvégzett kísérletekben a rezisztens daganatot hordozó egerek jelentős túlélését idézték elő.



39. ábra. A Reversin 205 jelű tripeptid tízszer aktívabb *in vitro*, mint a hasonló célra kifejlesztett 11 aminosavat tartalmazó CIKLOSPORIN

A 39. ábrán látható REVERSIN 205 jelű tripeptidszármazékunk az *in vitro* tesztekben 1-2 nagyságrenddel aktívabbnak bizonyult, mint a gyógyszer-rezisztencia ellen kifejlesztett és a klinikai kipróbálás stádiumában levő 11



aminosavból álló CIKLOSPORIN-analóg. Ez indokolta szabadalmaztatását, mivel jogosan feltételezhetjük, hogy a jövő ígéretes gyógyszerjelöltjeinek tekinthetők ezek a vegyületek.

És most szeretnék visszatérni a címben említett „Remények – realitások” szópárra. Mit is akartam ezzel kifejezni?

Szerettem volna kinyilvánítani azt a meggyőződésemet, hogy a kutató mindenütt a világon arról ismerhető fel, hogy:

- hisz abban, amit csinál,
- reméli, hogy kutatásai során eredményeket ér el,
- sőt a merészebbek (vagy az elvetemültebbek) még azt is remélik, hogy kutatásaik eredményei kézzelfogható gyakorlati haszonnal is járnak.

Ez utóbbi reményeknek a legtöbb esetben a *realitások* szabnak határt vagy állítanak leküzdhetetlen akadályokat. A realitásoknak két fajtája van:

- az egyik, amelynek a megjelenését a kőkemény objektív okok, mint pl. a fejlesztéshez szükséges pénzügyi háttér hiánya motiválja,
- a másik, amelyet erősen szubjektív okok irányítanak, nevezetesen az érdeklentét vagy éppen az érdekeltség hiánya motivál.

Mindkettő súlyos tünet, de a kettő együtt végzetes lehet a kutatási eredmények gyakorlati hasznosítása szempontjából.

Kutatócsoportunk ebből a szempontból nem tartozik a legszerencsésebbek közé, voltak ugyan kudarcaink, de azért megtanultuk a *realitásokat* tisztelni. E tisztelet mellett a reményeinket a jövőben sem adjuk fel. És ezt tudom ajánlani minden kutató kollégámnak.

Úgy gondolom, a jelenlévők előtt teljesen nyilvánvaló, hogy egy ilyen hatalmas munkát, amelyről az elmúlt egy óra alatt szóltam, és amelynek az időkorlát miatt csak a felületén, a legfelső rétegen tudtam kalandozni, kizárólag egy hosszú időn át együtt dolgozó, jól összehangolt, kiváló kutatókból álló team képes elvégezni. Éppen ezért először közvetlen munkatársaimnak szeretném megköszönni közreműködésüket, munkájukat. Közülük három munkatársamat szeretném név szerint és külön is említeni: dr. Kéri György a tudomány doktora, dr. Mező Imre, dr. Seprődi János Attila főmunkatársak, akiket nemcsak köszönet illet, hanem annak a ténynek a közlése is, hogy nélkülük ez a munka nem készülhetett volna el.

Gondolom, az is nyilvánvaló, és erre előadásom során többször is utaltam, hogy egy ilyen széles körű kutatási aktivitást és egymástól távol eső kutatási tevékenységet igénylő munkát csak jól összehangolt együttműködés keretében lehet megvalósítani, hiszen a bemutatott eredmények eléréséhez – mint azt láthattuk – szükséges volt a polimer kémiától az endokrinológiai kutatásokig, a jelzéstechnikától a tumorbiológiai kutatásokig számos kutatási terület együtt-

működése. Szerencsésnek mondhatjuk magunkat, mert mindig sikerült a legjobb partnert megtalálnunk a nélkülözhetetlen együttműködéshez. Szeretném nekik is megköszönni munkájukat, közreműködésüket. Úgyszintén a külföldi együttműködő partnereket is köszönet illeti.

S végül, de nem utolsósorban szeretnék köszönetet mondani a Magyar Tudományos Akadémiának, ezen belül is elsősorban a Biológiai Tudományok Osztályának, amiért érdemesnek tartott arra, hogy tagjai közé válasszon.



Freund Tamás

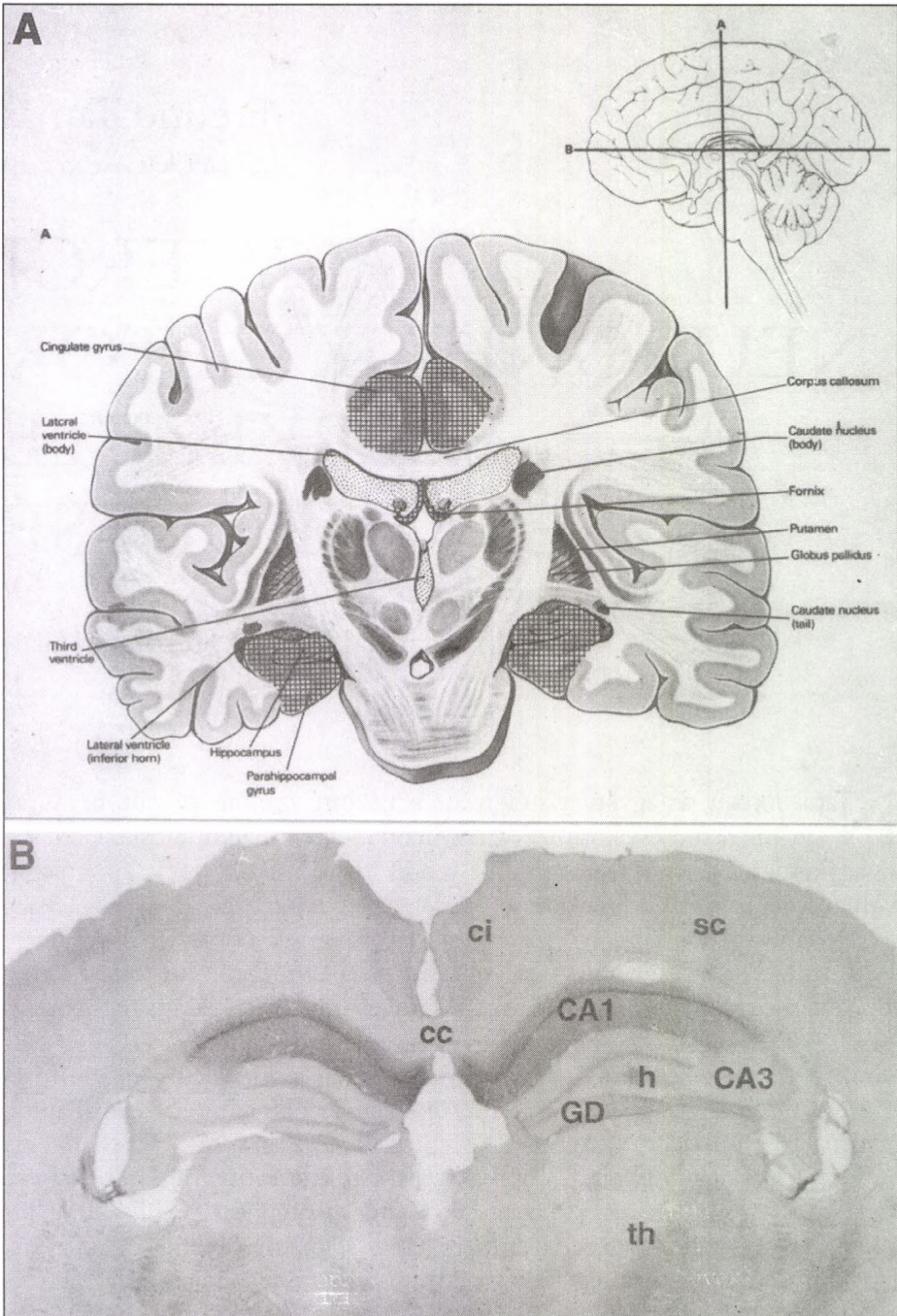
az MTA levelező tagja

# AGYKÉRGI NEURONHÁLÓZATOK SZERKEZETE ÉS MŰKÖDÉSE

Elhangzott 1998. szeptember 16-án

Napjainkban, az agykutatás évtizedében szinte szállóigévé vált, hogy „az agy megismerése korunk legnagyobb kihívása”. Ez különösképpen igaz az agykéregre, mely a legmagasabb rendű idegi működések központja. Itt zajlik például a tudatos érzékeléssel, cselekvéssel, tanulással, memóriával kapcsolatos folyamatok többsége. *Vajon megismerhető-e maga a megismerést végző szerkezet, az agykéreg?* Ez egy megválaszolhatatlannak tűnő, örök filozófiai kérdés, melyet én nem a filozófiai, hanem a kísérletes biológiai oldalról fogok megközelíteni. Az alábbiakban szeretném egy-két jelentősen leegyszerűsített példán keresztül érzékeltetni, hogy az agykérgi működések kutatójának feladata közel sem reménytelen, de azért a „korunk legnagyobb kihívása” megállapítás jogosnak mondható.

Térjünk rá egy konkrét példára! Munkacsoportom már több mint tíz éve foglalkozik az agykéreg egy specializált régiója, a hippocampus funkcionális felépítésével (1. ábra). A tanulási és memória-folyamatokban kulcsszerepet játszó hippocampus egy ősi agykérgi struktúra, mely az agykéreg minden érző és asszociációs területével közvetett reciprok kapcsolatban áll az entorhinális kér-

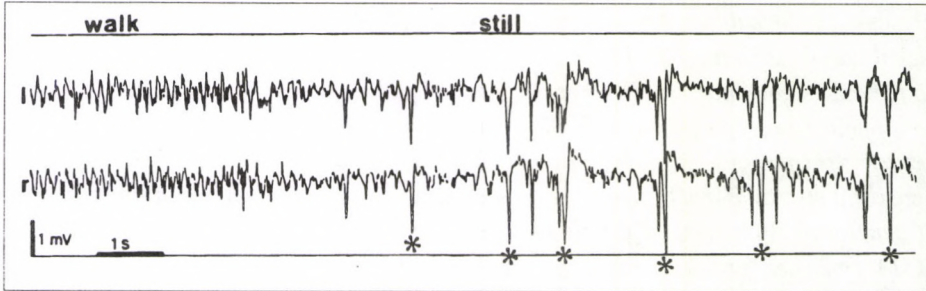




- ⇐ 1. ábra. A) Sematikus rajz a humán agykéreg régióiról, amelyen a hippocampus lokalizációja is jól megfigyelhető a ventralis temporalis lebenyben. A jobb felső inzert a metszési síkot ábrázolja. B) Frontális metszet patkány előágyból, amelyen a hippocampus egyes régiói jól elkülöníthetők. A CA1 régió fekete színéért egy ezüstözési eljárás felelős, mely pusztuló sejteket fest. Ebben az esetben a CA1 régió szelektív pusztulását 10 perces ischaemia okozta. Rövidítések: CA1–3, a hippocampus (azaz cornu Ammonis, vagy Ammon-szarv) régiói Lorente de No nyomán; GD, gyrus dentatus; h, hilus; sc, somatosensoros kéreg; ci, cingulate cortex; cc, corpus callosum; th, thalamus

gen keresztül. Valamennyi érzékszervből származó információ eljut ide, majd itt társítódnak egymással, átalakulnak hosszú idejű tárolásra alkalmas formába, és végül visszajutnak a neocortexbe. A memória tárolását tehát hosszú távon nem a hippocampus végzi, hanem az agykéreg egyéb specifikus régiói. A hippocampus feladata a memórianyomok beégetése és az egyes érzékszervi információk társítása. A társítás pedig elsősorban térinformációhoz történik. John O'Keefe és munkatársai (összefoglalóként lásd O'Keefe és Nadel, 1978) már az 1970-es évek végén felfedezték, hogy a hippocampusban ún. „place”-sejtek vannak (ezt az elnevezést jobb híján térsejtként fordítottuk magyarra). Ez azt jelenti, hogy ezek a sejtek, melyek a hippocampus neuronjainak többségét teszik ki, csak akkor sülnek ki, ha az állat a térnek egy bizonyos, az adott sejtre specifikus pontján tartózkodik. Így minden sejtnek megvan a maga tere az állat rendelkezésére álló mozgástéren belül, ahol aktivitása sokszorososa az ún. háttérkislüléseknek. Ezeken a „térmező”-szelektív sejteken keresztül a hippocampus egy ún. kognitív térképet épít ki és tárol a külvilágról. Ezekhez a térképpontokhoz (az egyedi térsejtek vagy adott kombinációik aktivitásához) asszociálja aztán az egyéb érzékszervi információkat, például a szag- és látási ingereket táplálékkeresés során.

Régóta ismert, hogy a hippocampus két jellegzetes, viselkedésfüggő aktivitásmintázatot generál, melyeket a legdurvább EEG-elektrodákkal is el lehet vezetni (2. ábra). Az egyik egy 4–8 Hz-es, azaz théta-frekvenciájú, ritmikus aktivitás, oszcilláció, mely kizárólag explorációs viselkedés, a környezet felderítése során figyelhető meg. A másik egy nagy frekvenciájú, irreguláris aktivitás, nagy amplitúdójú „éles hullámokkal” tűzdelve, amely éber nyugalmi állapotban, táplálkozás és lassú hullámú alvás során jelenik meg a hippocampális EEG-n (Buzsáki, 1986; 1989; Buzsáki et al., 1983). Ha théta-aktivitás során egy hippocampális idegsejtből elektromos jeleket vezetünk el intracellulárisan, akkor csupán néhány millivoltos potenciáloszcillációt mérhetünk. Ez azonban kis amplitúdója ellenére megjelenik egy durva agyfelszíni EEG-elektrodán is, ami azzal



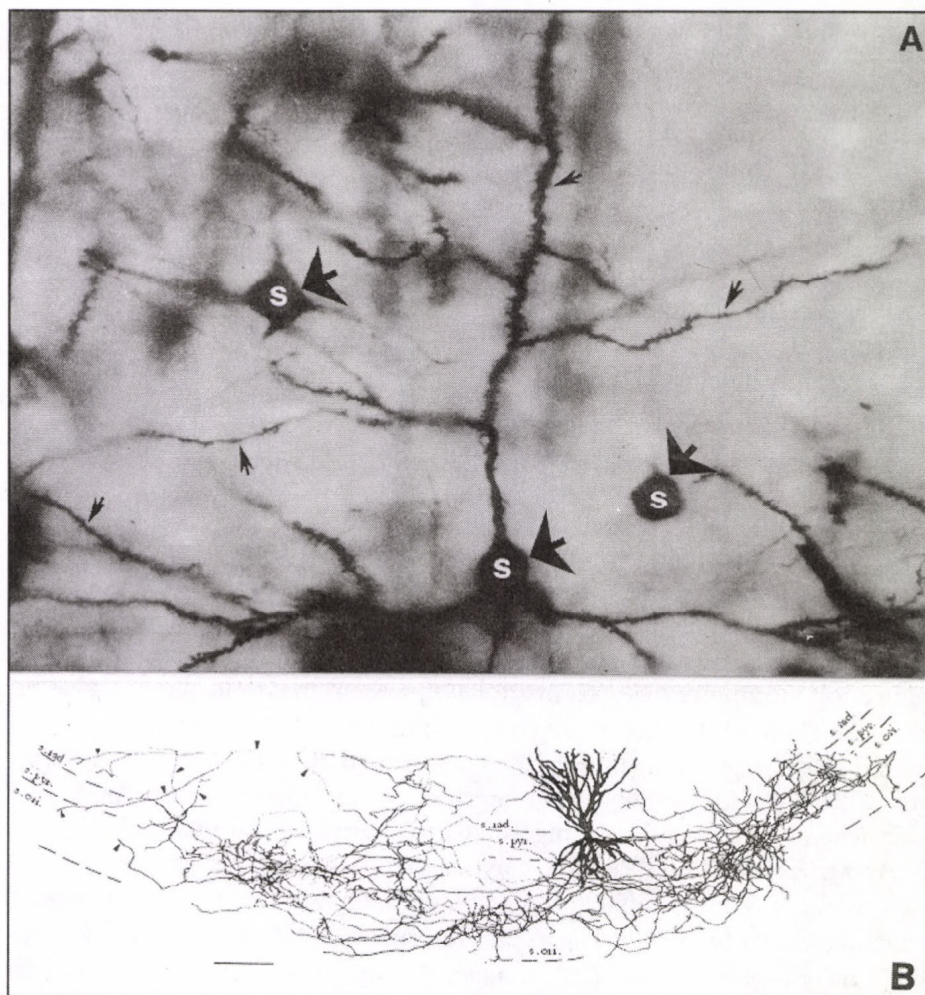
2. ábra. Viselkedésfüggő elektromos aktivitás-mintázatok (EEG-mintázatok) a hippocampusból. Exploráció során (és paradox alvás alatt) 4–8 Hz-es ritmikus oszcilláció, azaz théta-aktivitás jellemzi a hippocampális EEG-t, míg éber nyugalmi állapotban és lassú hullámú alvás során nagy frekvenciájú, kis amplitúdójú irreguláris aktivitás figyelhető meg, melyre jellemző a számos éles (vagy meredek) hullám (Sharp Wave: SPW) megjelenése (néhányik csillaggal jelölve). Ez utóbbiak a CA3 régió piramissejtjei szinkron kisüléseinek eredményei. (Buzsáki György ábrája)

magyarázható, hogy ez a potenciál-ingadozás minden sejtben teljesen egyszerre történik, működésük szinkronizált. Buzsáki György ma már széles körben elfogadott elmélete szerint (Buzsáki, 1989) ez a két EEG-mintázat a memóriarögzítés két különböző fázisának feleltethető meg: a théta a memóriaa kvízíciónak, míg az éles hullámú fázis a memóriakonszolidációnak. Az éles hullámok nagyszámú piramissejt szinkron kisülésének eredményei, melyek során egy-egy rövid explorációs fázis információtartalmának beégetése történik. Ez a szinkron kisüléssorozat lenne a kiváltója annak a tartós szinaptikus megerősödésnek, amit a tanulási és memóriafolyamatok sejt szintű alapmechanizmusának tartanak. Ezen viselkedésfüggést mutató EEG-mintázatoknak a generálódási mechanizmusát és funkcióit csak akkor érthetjük meg, ha feltárjuk az őket létrehozó egyedi sejtek és elemi sejt hálózatok anatómiai-fiziológiai tulajdonságait és kapcsolódási törvényszerűségeiket. Induljunk ki az elemi építőkövekből az egyedi idegsejtekből, és az egyes típusaik közötti specifikus interakciókból!

## Sejttípusok és interakcióik jellegzetességei a hippocampusban

Az idegrendszeri jelfeldolgozás egységei az idegsejtek, melyek morfológiája rendkívül változatos. Abban azonban megegyeznek, hogy szinte valamennyi idegsejt rendelkezik egy sejttesttel, egy dendritfával és egy axonfával (3. ábra). A dendritfa tulajdonképpen a sejt jelfelfogó berendezése, melyre a jelek szí-





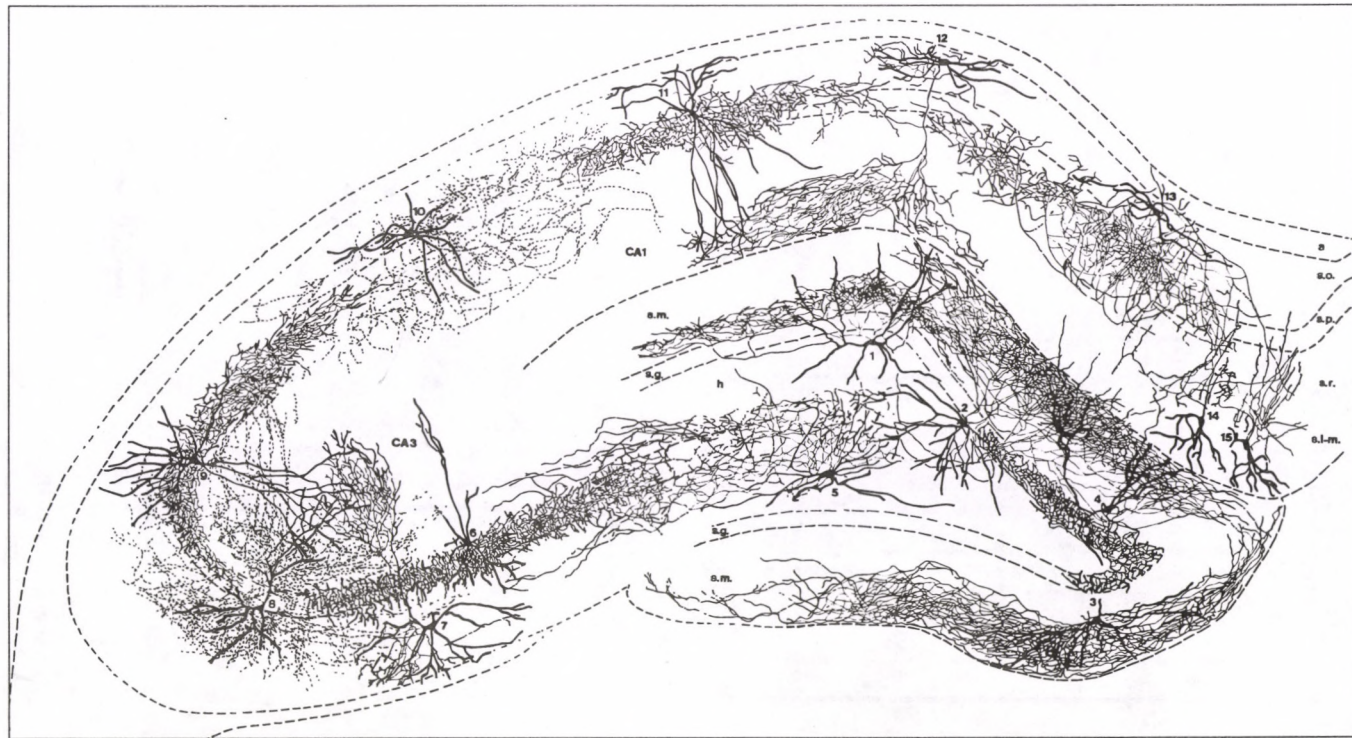
3. ábra. A) Fénymikroszkópos kép az agykéreg valamennyi régióját felépítő fősejtekről, azaz piramis sejtekről (nagy nyilak). A felvétel egy Golgi-impregnált 80  $\mu$ m vastag metszetről készült, melyen a festett sejtek szómája (s) és dendritjei (kis nyilak) feketén tűnnek fel. B) Egy intracellulárisan töltött hippocampális piramis sejt rekonstrukciója teljes axon- és dendritfájával. A szómából eredő számos vastagabb nyúlvány jelzi a dendriteket, míg a teljes hippocampust behálózó vékonyabb nyúlványrendszer az axonarborizáció. Ez az egyetlen piramis sejt több mint 15 000 axonterminálissal rendelkezik, ami azt jelenti, hogy legalább ennyi szinaptikus kapcsolatot létesít további idegsejteken. (Sík et al., 1993). Rövidítések (a hippocampus rétegei): s. rad, stratum radiatum; s. pyr, stratum pyramidale; s. ori, stratum oriens



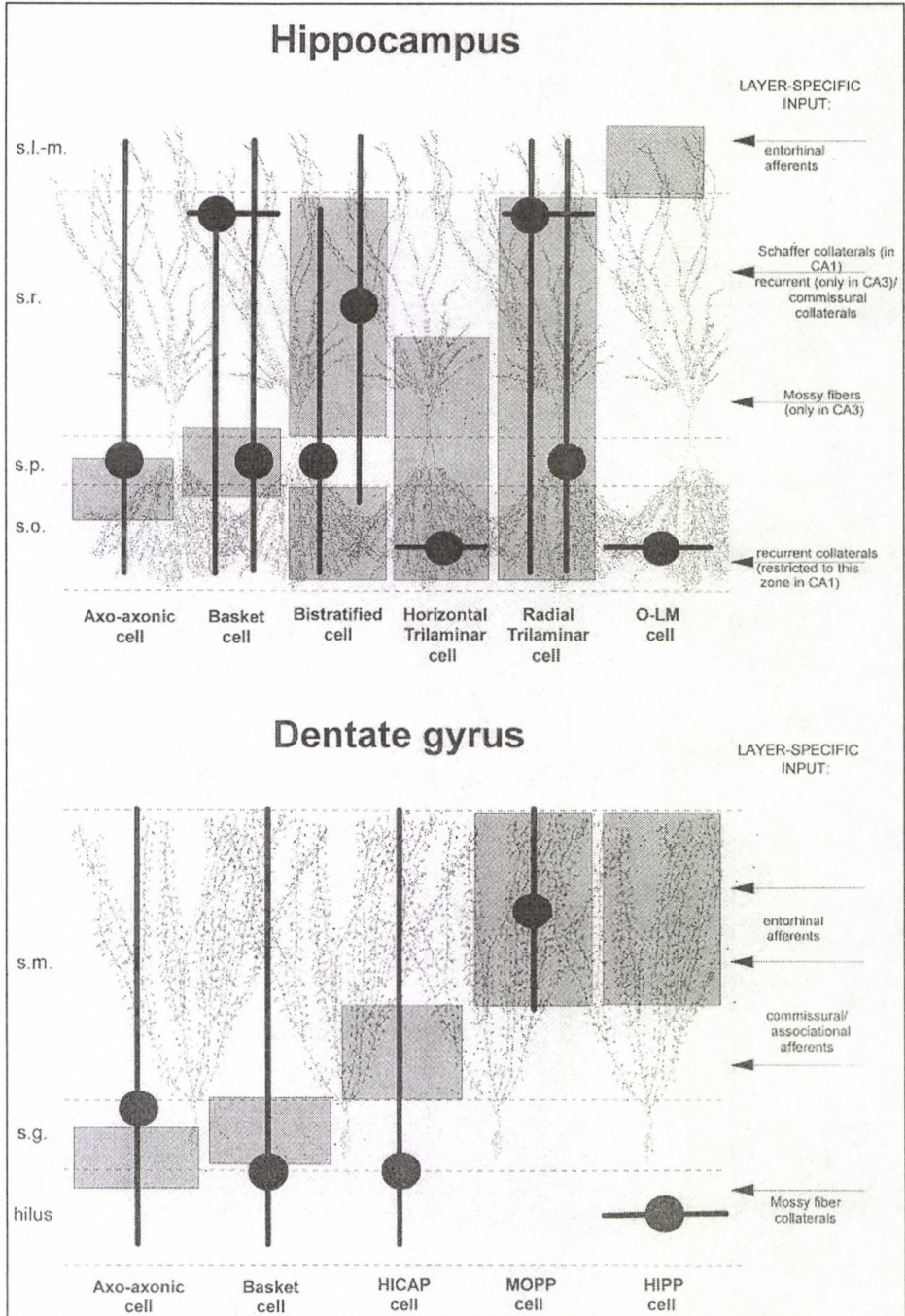
napszisok közvetítette impulzusok formájában érkeznek. Ezek a szinapszisok lehetnek serkentők vagy gátlók, az ingerület-átvivő anyag és receptorának típusától függően. Az axon jeltovábbításra specializálódott struktúra, melyen az akciós potenciál végigszalad, és a végződésekből felszabadított ingerület-átvivő anyag (transzmitter) révén továbbítja a jelet a neuronlánc következő neuronjaira. A sejttest (szoma) a sejt anyagcsereközpontja, de emellett van egy másik rendkívül jelentős funkciója is. Az axon kezdeti szakaszával (iniciális szegmentum) együtt felelős a nátriumfüggő akciós potenciálok, azaz a jel generálásáért. Tulajdonképpen itt dől el, a serkentő és a gátló impulzusok összegzése után, hogy egy adott beérkező jelkombinációra miként válaszol a sejt, azaz milyen jeleket küld tovább. Ez a régió, amit periszomatikus (sejttest körüli) régiónak nevezünk, tehát egyfajta integrációs központja is a sejtnek. A szoma kis felszíne miatt csak minimálisan vesz részt az impulzusok fogadásában, ezek is elsősorban gátló hatásúak.

Helyezzük be idealizált idegsejteinket a hippocampus idegsejthálózatába. Már Ramón y Cajalnak a századfordulón készült munkáiból ismert (Ramón y Cajal, 1911), hogy az agykérgi neuronok többségét piramis sejtek alkotják (3. ábra). Ezek a sejtek serkentők, ingerület-átvivő anyaguk a glutaminsav, és a jeleket az adott kéregterületen kívülre továbbítják, tehát vetítő, azaz projekciós neuronok. Rendelkeznek azonban helyi, visszakanyarodó axonágakkal is, melyeken keresztül elsősorban egymást serkentik. Nyúlványrendszerükre jellemző egy vastag csúcsi (ún. apikális) dendrit, amely szinte valamennyi rétegen áthalad. Az idegsejtek egy kéregterületenként változó gyakoriságú kisebb százaléka (10–35%) gátlósejt, ingerület-átvivő anyaguk gamma-amino-vajsav (GABA). Axon- és dendritfájuk helyi elágazódású, ezek a sejtek tehát interneuronok. Míg a piramis sejtek morfológiája egy adott kéregterületen belül nagymértékben hasonló, addig a gátló interneuronok formagazdagsága rendkívül nagy (4. ábra), mint azt Szentágothai János korai agykéregskemáin már érzékeltette (Szentágothai, 1962; Szentágothai és Arbib, 1974). A különböző formák működésbeli heterogenitásra utalnak, de vajon milyen feladatokra specializálódtak ezek az interneuronok? Egy kivételtől eltekintve, melyre az alábbiakban még kitérek, valamennyi interneuron-típus elsősorban piramis sejteket idegez be, azok nagy populációinak együttes gátlására képes. A legszembetűnőbb különbség köztük abban van, hogy axonjaik a piramis sejtek más-más részein végződnek (sinaptizálnak), tehát ezen sejtrészek működésének specifikus szabályozására lehetnek képesek. Egy nagy csoportjuk a piramis sejtek periszomatikus régiójának beidegzésére specializálódott, ahol a nátriumfüggő akciós potenciáloknak, azaz a sejt kimeneti jelének a generálása történik. Egy hasonló nagy interneuron-populáció a piramis sejtek dendritfáján





4. ábra. A hippocampus különböző gátló interneuron-típusainak rekonstrukciói axon- és dendritfával. Az axonok réteg szerinti végződési mintázata alapján megállapítható, hogy az adott típus a piramissejtek dendritfáját, vagy szoma körüli (periszomatikus) régióját idegzi be. Ennek alapján például a 4, 6, 9, 11-es sejtek periszomatikus gátlósejtek (kosár- és axo-axonikus interneuronok), míg az 1, 2, 3, 5, 7, 8, 10, 12, 13-as sejtek a dendritikus gátlósejtek egy-egy típusát képviselik. A 14. és 15-ös sejtek más interneuronok beidegzésére specializált típusok (Freund és Buzsáki, 1996)



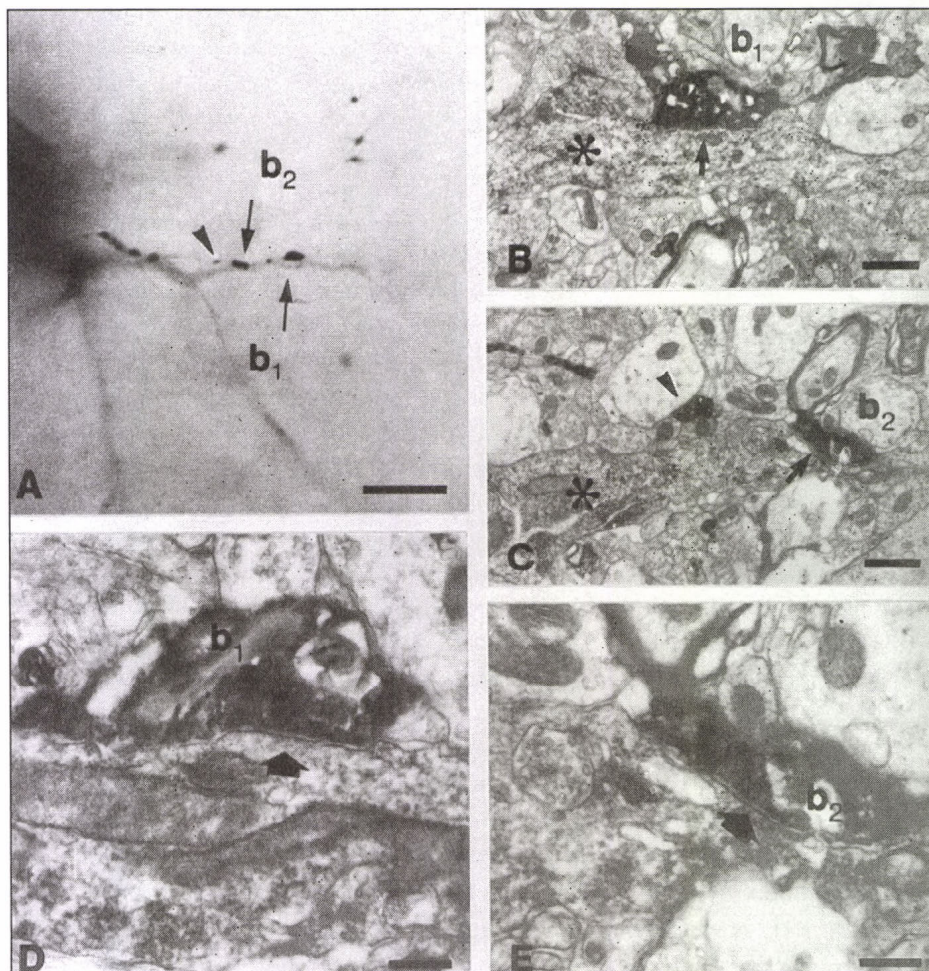


⇐ 5. ábra. A hippocampus gátlósejtjeinek funkcionális klasszifikációja axonjuk végződési stratégiája alapján. A 4. ábra sejtípusainak sematizált illusztrációja, a háttérben pontozottan a piramis-sejteket, illetve a gyrus dentatus fősejtjeit, a szemcsesejteket ábrázoltuk, jelezve a sejtessejteik és dendritfaik rétegszerinti eloszlását. Az ábra jobb szélén az egyes rétegekben specifikusan végződő afferenseket, bal szélén a rétegek neveit tüntettük fel. A periszomatikus gátlósejtek két csoportot alkotnak, az axo-axonikus és kosársejteket. Az előbbi a piramis-sejtek axon kezdeti szakaszát, az utóbbi a sejttestét és proximális dendritjeit idegzi be szelektíven. A dendritikus gátlósejtek csoportjai aszerint különíthetők el, hogy a piramis- vagy szemcsesejtek melyik fő bemenetével végződnek azonos rétegben a dendritfán, azaz mely afferens hatékonyságát, plaszticitását szabályozzák

végződik, melyről megállapítottuk, hogy a jelfelfogásban van szerepe. Ezeket a markáns különbségeket a hippocampális kéregben lehet legjobban nyomon követni, hiszen itt a piramis-sejtek szomái és dendritfái külön réteget alkotnak, így az adott interneuron axonjának réteg szerinti eloszlása már megadja, hogy a piramis-sejt mely doménjét idegzi be (5. ábra).

A két fő gátlóinterneuron-csoport közötti funkcionális különbség ezek szerint a dendritfa és a sejttest közötti funkcionális különbségből közvetlenül adódik, aminek leglényegesebb elemei a következők: a dendritfában lokalizált az idegrendszer egyik alapvető sajátosságával, a tanulással, memóriával kapcsolatos folyamatok többsége. A memória sejt szintű modelljeiben a kulcsfolyamat a serkentő szinapszisok szelektív megerősödése (Long Term Potentiation vagy LTP, lásd Bliss és Lomo, 1973), illetve gyengülése (Long Term Depression vagy LTD), amelyeket együttesen szinaptikus plaszticitásnak nevezünk. Bármilyen szinaptikus plaszticitási folyamatnak előfeltétele a sejten belüli szabad kalciumszint átmeneti megemelkedése, melynek két fő útja ismert: a serkentő aminosav transzmitter, a glutamát feszültségfüggő (NMDA típusú) receptorának aktiválása vagy feszültségfüggő kalciumcsatornák nyitása. Mindkét folyamat elsősorban a dendritfára jellemző, mely egyben a serkentő, glutamáterg szinapszisok végződési területe is. Ezzel ellentétben a periszomatikus régió glutamáterg szinapszisokat nem kap, a szinaptikus plaszticitási folyamatokban ilyen módon nem vesz részt, viszont a nátriumfüggő akciós potenciálok, melyek a sejt kimeneti jeleit adják, itt generálódnak. Adódik tehát a hipotézis, hogy a dendritikus gátlást végző interneuronok a piramis-sejtek bemenetét, annak plaszticitását regulálják, míg a periszomatikus gátlásért felelős interneuronok a piramis-sejtek (és egyben az adott agykéreg régió) kimeneti jeleit szabályozzák (6–8. ábrák). Piramis-sejtek szomájából, illetve dendritjéből történő intracelluláris elvezetéssel és az ide futó gátlórostok vagy az itt végződő gátló interneuronok szelektív ingerlésével sikerült hipotézisünket igazolni (Miles et al., 1996). Hasonló páros intracelluláris



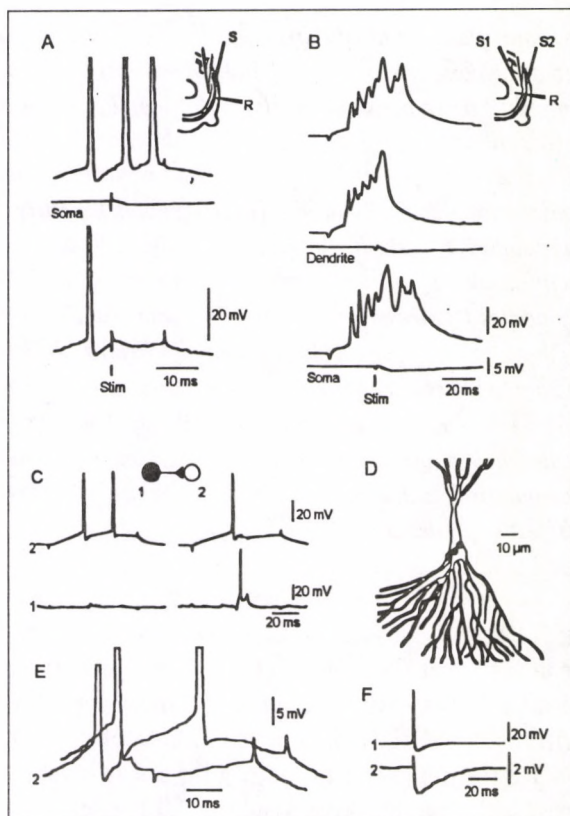


6. ábra. Fénymikroszkópos felvétel egy a 8. ábrán látható páros elvezetés és töltés sejtéről. A preszinaptikus gátlósejt kosársejt volt, melynek axonja végigkúszik a posztzinaptikus piramisajt egyik basalis dendritjének proximalis szakaszán, számos varikozitást adva. Ezek közül a  $b_1$ -es és  $b_2$ -es végződés korrelált elektronmikroszkópos képét láthatjuk a B, D, illetve C, E ábrákon, melyek jól mutatják, hogy a terminálisok a gátlósejtekre jellemző szimmetrikus szinapszist adnak a jelzett piramisajt dendritjére. (Miles et al, 1996)

elvezetéssel és ezt követő fény- és elektronmikroszkópos vizsgálatokkal megállapítottuk, hogy a gátlósejteket a piramisajt képesek akár egyetlen szinapszison keresztül is aktiválni, és egyetlen gátlósejtre több ezer piramisajt ad beideg-zést, zömmel egyszeres szinapszisok közvetítésével (Gulyás et al., 1993).



7. ábra. A periszomatikus és dendritikus gátlósejtek közötti funkcionális különbségek demonstrációja páros intracelluláris elvezetéssel. A) Piramissejt szomájából történő elvezetéssel és a periszomatikus régióba futó gátlórostok szelektív ingerlésével bizonyítható, hogy ez utóbbi gátlástípus a piramissejtekben kiváltott repetitív tüzelést gátolja (felső elvezetés gátlás nélkül: 3 akciós potenciál; alsó elvezetés gátlással: 1 akciós potenciál) B) Piramissejt dendritjéből történő elvezetéssel és a dendritikus régióba futó gátlórostok szelektív ingerlésével bizonyítható, hogy ez a gátlástípus a piramissejtek dendritjében generált  $Ca^{2+}$ -függő elektrogenézist, a  $Ca$ -mediált akciós potenciálok keletkezését gátolja, ezen keresztül szabályozza a szinaptikus bemenetek plaszticitását és hatékonyságát. C) Egyetlen gátlósejt (1-es elvezetés) egyetlen akciós potenciálja is képes a piramissejt (2-es elvezetés) repetitív tüzelését gátolni, a két kisülésből a másodikat abortálni (részleteiben lásd az E ábrán). Feltöltés után a gátlósejt kosársejtnékk bizonyult, mely 3 szomatikus szinapszist létesített a piramissejten (D). F) A kosársejt (1) kisülése hiperpolarizálja a piramissejt (2) membránpotenciálját 2 mV-tal. (Miles et al., 1996)



Eredményeinkből következik, hogy a gátlás rendkívül hatékony, egyetlen kosársejt egyetlen kisülése is leállíthatja nagy piramissejt-populációk tüzelését. Ugyanakkor a gátlósejtek aktiválása a piramissejtek által ugyancsak rendkívül effektív, néhány piramissejt szinkron kisülése már elégséges ahhoz, hogy posztszinaptikus interneuronjaik többsége aktiválódjék a hippocampus csaknem teljes területén.

Ilyen körülmények között nehéz elképzelni, hogy a neuronhálózatban tanulási folyamatok játszódjanak le. A szinaptikus erősség tartós fokozódásához

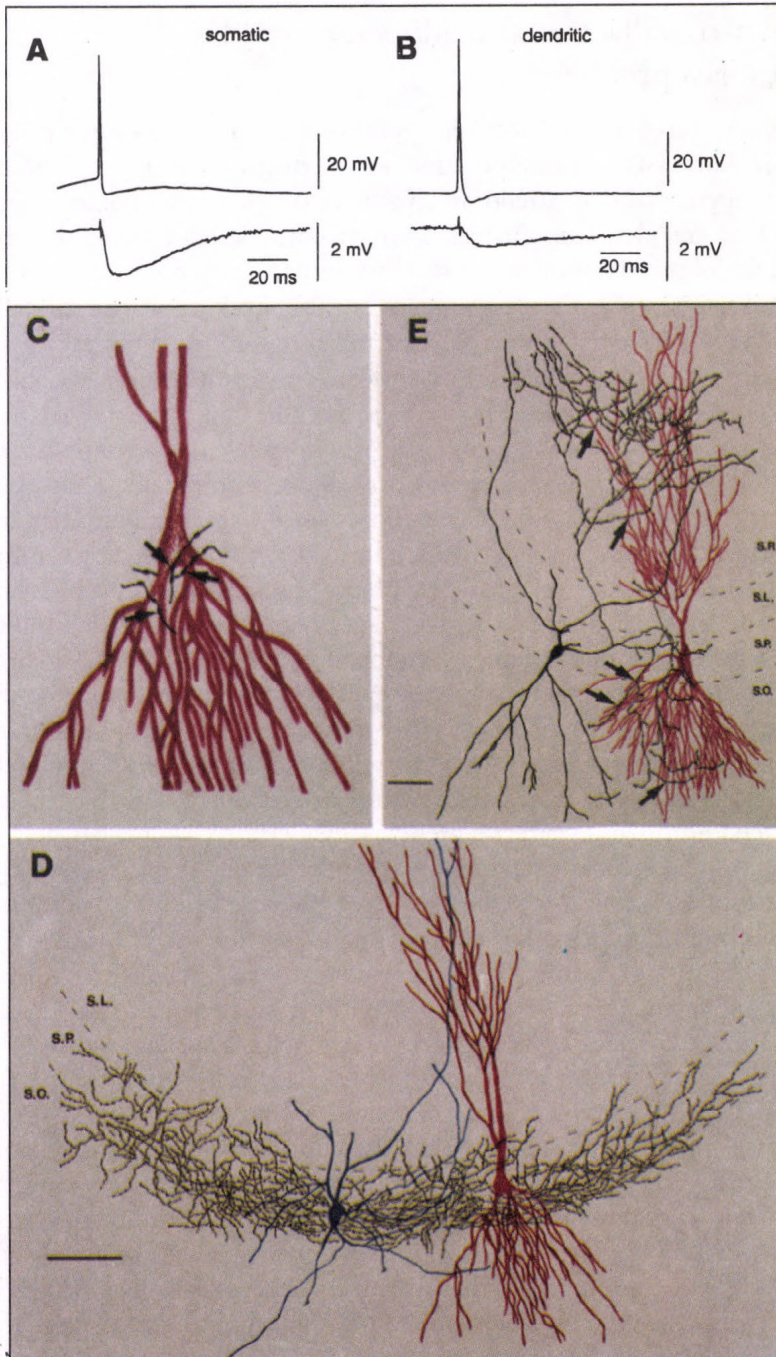
8. ábra. Páros intracelluláris elvezetések és sejtrekonstrukciók monoszínaptikusan össze-  $\Rightarrow$  kötött gátlósejt-piramissejt párokból in vitro hippocampus-szeletekben. A preszínaptikus sejtek periszomatikus (A, C, D), illetve dendritikus (B, E) gátlósejtek, a poszt-színaptikus sejtek piramissejtek. A gátlósejtekben kiváltott akciós potenciál (A és B felső elvezetés) a poszt-színaptikus piramissejtekben membrán-hiperpolarizációt (gátló poszt-színaptikus potenciált, IPSP) váltott ki, melynek amplitúdója, időbeli lefutása, variabilitása mérhető. A sejt párok feltöltésével azonosíthatók az interakcióban részt vett sejt típusok, valamint a poszt-színaptikus potenciál kiváltásáért felelős szinapszisok száma és pontos lokalizációja is meghatározható. Az A ábrán látható interakcióért a D ábrán látható kosársejt (dendritja kék, axonja fekete) a felelős, amely három kontaktust (nyílak a C ábrán) létesített a poszt-színaptikus piramissejt (piros) sejttestjén és proximális dendritjén. A B ábrán látható gátló potenciált egy dendritikus gátlósejt hozta létre (E ábra, kék sejt, fekete axonnal), mely 5 kontaktust létesített a piramissejt dendritfáján (nyílak). A kontaktusok szinapszis voltának igazolása elektronmikroszkópos úton történik, lásd 6. ábra. (Miles et al., 1996)

(LTP) szükséges két körülmény is gátolt lenne: 1) a nagy sejtpopulációk szinkron kisülését (beégetés) lehetővé tevő rekurrens kollaterálisok általi serkentés, amit a visszacsatolásos periszomatikus gátlás hatástalanít, valamint 2) a dendritikus depolarizáció, amit az előreccsatolásos dendritikus gátlás vétőzna meg.

Jól tudjuk azonban, hogy a hippocampusban tartós szinaptikus erősségváltozás könnyedén kiváltható, az LTP jelenségét itt fedezte fel Bliss és Lomo (1973), és azóta is a hippocampus az LTP-mechanizmusok kutatóinak legkedveltebb agyterülete. A paradoxon megoldásának kulcsa a gátlás szinkronizált-ságában és pontos időzítésében rejlik. Ennek megvalósítására jelenleg két mechanizmust ismerünk, melyek más-más frekvencián szinkronizálják a gátlást, és különböző funkcióval rendelkeznek.

Az egyik mechanizmus olyan gátlósejtek működésén alapszik, melyek nem piramissejteket, hanem kizárólag más gátlósejteket idegeznek be. Így azok kisüléseit akár 40–100 Hz-es frekvenciával is képesek lehetnek szinkronizálni, ami magyarázná, hogy az egymástól térben távol elhelyezkedő piramissejtek működése is 40–100 Hz-en szinkronizálódik (gamma-oszcilláció). A legújabb elképzelések szerint ez a teljes agykéregfelszínen szinkronitást mutató gamma-oszcilláció lenne a tudatos érzékelés neuronhálózati alapja (Gray et al., 1989). A szinkronizáció másik mechanizmusa hippocampuson kívüli, kéreg alatti eredetű, és a theta-frekvenciájú szinkronizációért felelős. A következő két fejezetben a gamma- és a theta-oszcillációk keletkezési mechanizmusairól és feltételezett funkcióiról lesz szó.





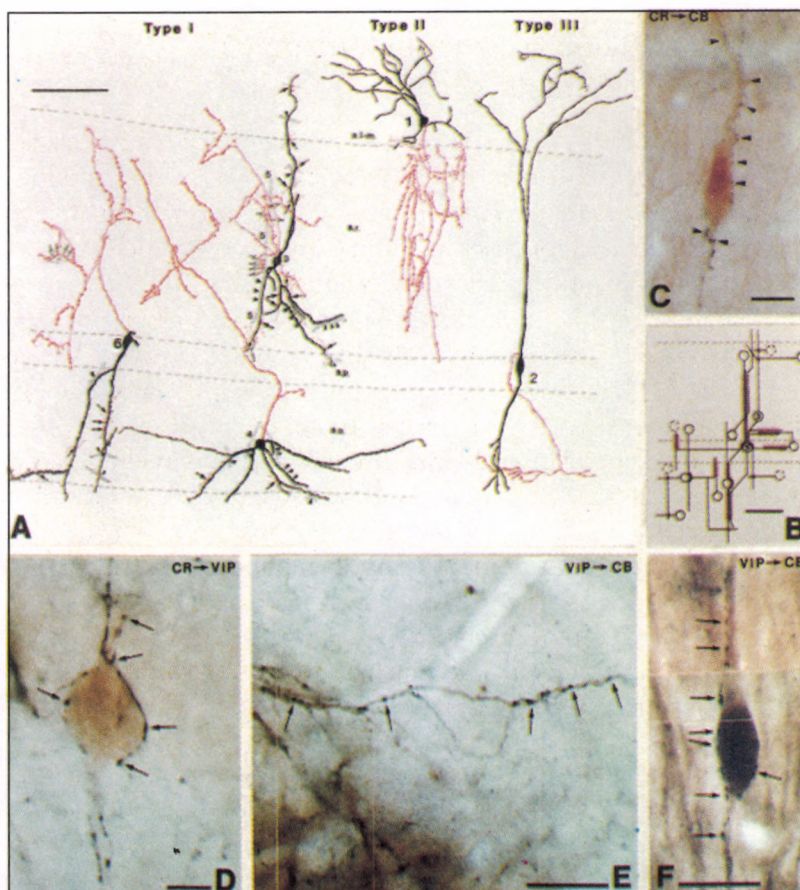


## Gamma-oszcillációk, azaz időbeli megoldás a kapcsolási problémára

Már régóta ismert, hogy a látott kép egyes komponensei, úgymint a szélek orientációja, kontrasztja, mozgása, színe, az elsődleges látókéreg különböző al-régióiba, egymással nem átfedő oszlopaiba vetülnek, és ott okoznak ingerületet. Ezek az érzékletkomponensek aztán más-más kéregterületekre kerülnek további feldolgozásra, mintegy eltávolodva térben egymástól. Az egyes objektumokról nyert kép így komponenseire bomlik. Ezek az elemi érzékletkomponensek nyilvánvalóan számos objektumban hasonlóak, a tárgyak egyediségét éppen az egyes általános komponensek adott egyedi kombinációi biztosítják. Hogyan áll végül össze ez a részeire bontott kép egy egységes perceptummá, ez az ún. kapcsolási probléma. A korai, általánosan elterjedt nézetek szerint léteznének magasabb rendű asszociációs kérgi mezők, ahová például valamennyi specifikus látómező vetítené, és még magasabb rendűnek tekinthető multimodális asszociációs mezők, ahol a különböző érzékszervi információk lennének összekapcsolhatóak. Ez a hipotézis a kapcsolási problémára térbeli megoldást kínál, amit úgy lehetne legegyszerűbben elképzelni, mintha az agyban egy ernyőre vetítenénk a különböző érzékszervi információtartalmú képeket, több vetítógéppel egyszerre. Az agyban jelen ismereteink szerint azonban nincs ilyen ernyő. Hogyan lehetne másként összehozni az érzékletkomponenseket? Ha térben nem, akkor időben. A ma legelfogadottabb hipotézis (Gray et al., 1989) azon alapszik, hogy az egy adott pillanatban specifikus információt hordozó agykérgi idegsejtek, legyenek azok a kéreg bármely pontján, szinkron sülnek ki. Valamennyi kéregterületen megfigyelhető egy 40 Hz-es oszcilláció, amely a sejtek kisülését milliszekundumos pontossággal képes szinkronizálni. Ennek a teljes agykérgi felszínen megvalósuló, hihetetlen precizitású szinkronizációnak, összerendezésnek a keletkezési mechanizmusa azonban még vitatott kérdés. Egyelőre csak hipotézisekkel rendelkezünk, amelyek közül az egyik saját eredményeinken alapszik.

Sikerült az agykéregben egy eddig ismeretlen gátló-sejttypust megfigyelünk, melynek posztszinaptikus célelemei – ellentétben a többi gátló interneuronnal – nem piramis sejtek voltak, hanem kizárólag más interneuronok (9., 10. ábrák; Acsády et al., 1996 a, b; Gulyás et al., 1996). Ezek a calretinin- (CR), illetve vasoactiv intestinal polypeptid- (VIP) tartalmú GABAerg sejtek egy további különleges tulajdonsága, hogy egymással többszörös dendrodendritikus és axo-dendritikus kapcsolatokat is képeznek. Ezen kapcsolatok révén egymáshoz viszonyított aktivitásuk szinkronizálódik, és így posztszinaptikus sejteiket – melyek piramis sejteket gátló nagy interneuron-populá-

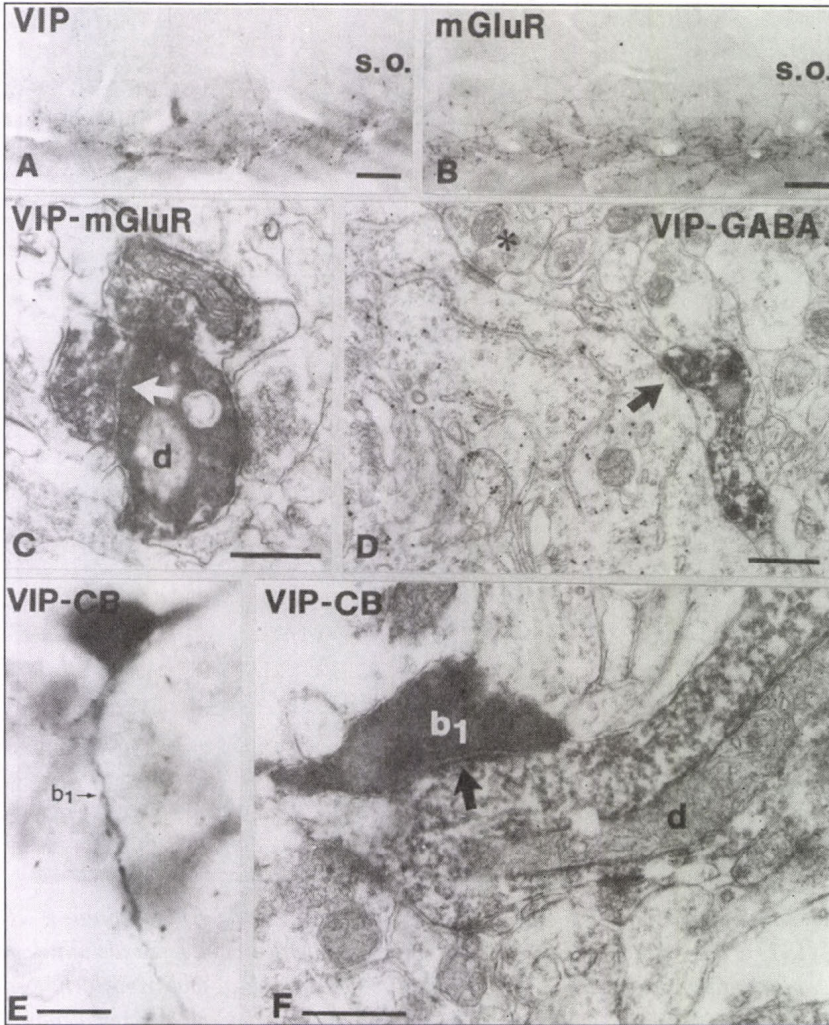




9. ábra. Más interneuronok beidegzésére specializálódott gátlósejtek. A) Calretinin- (CR) tartalmú (IS1) és VIP-tartalmú (IS2 és IS3) GABAerg interneuronok rajza (dendritiek feketével, axonok pirossal rajzolva). A CR-tartalmú sejtek egymással többszörös dendro-dendritikus (nyílhegyek jelzik a kapcsolatokat a szaggatott vonalakkal ábrázolt dendritekkel, melyek más CR-pozitív sejtekhez tartoznak) és axo-dendritikus (nyílak) kapcsolatokat létesítenek. B) az így kapcsolt CR-tartalmú sejtek által alkotott clusterok nagy kiterjedésűek lehetnek, az ábrán a kapcsolt sejtek réteg szerinti eloszlása látható, az összefekvő dendritszakaszok hosszát piros vonalkázás jelzi. C, D) Kettős immunfestéssel igazoltuk, hogy a CR-tartalmú sejtek axonja (fekete) szelektíven idegzi be a calbindin (barna, C ábra), illetve a VIP- (barna, D ábra) immunreaktív gátló interneuronokat, többszörös kontaktust létesítve rajtuk. Hasonló célsejt-szelektivitással rendelkeznek az IS2 és IS3 típusú VIP-pozitív sejtek, amint az az E és F ábrákon látható. A kontaktusok elektronmikroszkópos képe a 10. E, F ábrákon látható.

Skálák: A, B, 100  $\mu$ m; C-F, 10  $\mu$ m. (Acsády et al., 1996a, b; Gulyás et al., 1996)





10. ábra. Az IS3 típusú VIP-tartalmú sejtek axonja a str. oriens/alveus határon ágazik el (A), ahol eloszlása pontosan átfed az O-LM típusú dendritikus gátlósejtek dendritfateroszlásával (B), mGluR1 elleni immunfestéssel láthatóvá téve. C) VIP-re és mGluR1-re kettősfestett metszetekben számos többszörös szinaptikus kontaktus (fehér nyíl) figyelhető meg VIP-axonok és O-LM sejt dendritek között (d). D) Immunogold-eljárással igazoltuk, hogy a VIP terminálisok GABAerg sejteken (lásd kolloid arany szemcsék akumulációja a sejttestben) szinaptizálnak (nyíl). E, F) A 9. E ábrán látott kontaktusok korrelált fény- és elektronmikroszkópos képei. Skálák; A, B, 30  $\mu$ m; C, D, F, 0,5  $\mu$ m; E, 10  $\mu$ m. (Acsády et. al, 1996a, b)

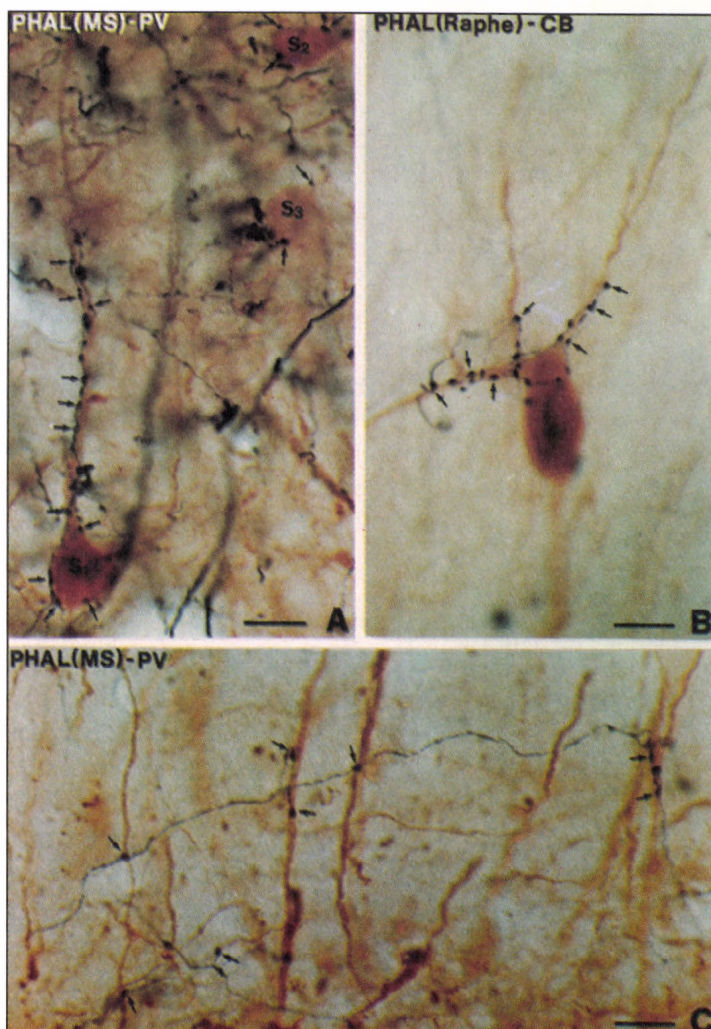


ciók – szintén képesek szinkronizálni. Ez a neuronhálózati szerveződés magyarázhatja a 40–100 Hz-es szinkronitást nagy kéregterületeken keresztül. Anatómiai eredményeinktől függetlenül Whittington és munkatársai (1995) elektrofiziológiai kísérleteikben igazolták, hogy egymástól több mint 1 mm-re lévő piramissejteken szinkron 40 Hz-es membrán-oszcilláció indukálható, ami GABA által közvetített ritmikus gátlás eredménye. A gátlósejtek szinkronizációja nem egy közös serkentő bemenet eredménye, mivel a serkentő ingerületátvitelt a kísérletben blokkolták. Számítógépes neuronhálózat-modellezéssel jutottak arra a következtetésre, hogy ez a fokú szinkronitás valószínűleg úgy jöhet létre, ha van egy gátló sejtpopuláció, mely más gátlósejteket idegez be. Buzsáki és munkatársai (1992) hasonló következtetésre jutottak a gátló sejt-aktivitás és a nagyfrekvenciás agykérgi oszcilláció kapcsolatának *in vivo* vizsgálata során. Az elektrofiziológiai kísérletek, a számítógépes modellezés és saját anatómiai eredményeink tehát ugyanahhoz a konklúzióhoz vezettek. Nevezetesen, a piramissejt-aktivitás 40–100 Hz-es szinkronizációja az agykéregben gátló interneuronok hasonló frekvenciájú kisüléseinek eredménye. Ezen gátlósejtek szinkronizálását egy erre specializálódott, ugyancsak GABA-val működő gátlósejt-populáció végzi, melynek tagjai egymással kiterjedt dendro-dendritikus és axo-dendritikus kapcsolatban állnak (9., 10., 12. ábrák). Ezek az eredmények az agykérgi gátlás funkcióiról alkotott elképzelések gyökeres megváltozásához vezettek, hiszen a gátlósejtek aktivitásának végső következménye nem gátlás, hanem a piramissejteken aktivitásának szinkronizációja, időzítése. Az adott pillanatban releváns információt hordozó idegsejtek kisülésének szinkronizációja pedig a percepciós idegrendszeri folyamatok kapcsolási problémájának megoldását jelentheti.

## Belső világunk gátlósejteken keresztül szabályozza az agykéreg funkcionális állapotát

Belső világunkról, az érzelmi, motivációs és általános fiziológiai állapotunkról specifikus kéreg alatti központok szállítanak információt az agykéreg szinte valamennyi területére. Ilyen központok például a raphe magvak, a basalis előagy, a locus coeruleus és a ventrális tegmentum, melyek szerotonin-, GABA-, acetilkolin-, noradrenalin- és dopamin-tartalmú pályákat küldenek az agykéregbe. Ezek a kéreg alatti magok csupán néhány ezer neuronból állnak, mégis képesek a több milliárd idegsejtet tartalmazó teljes agykéreg működésének rendkívül hatékony szabályozására. Az agykéreg elektromos aktivitás-mintázatát, EEG-frekvenciáját, szinkronizált vagy éppen deszinkronizált működését képesek befolyásolni ezek a kis magvak, melyek funkciója az alvás-ébrenlét

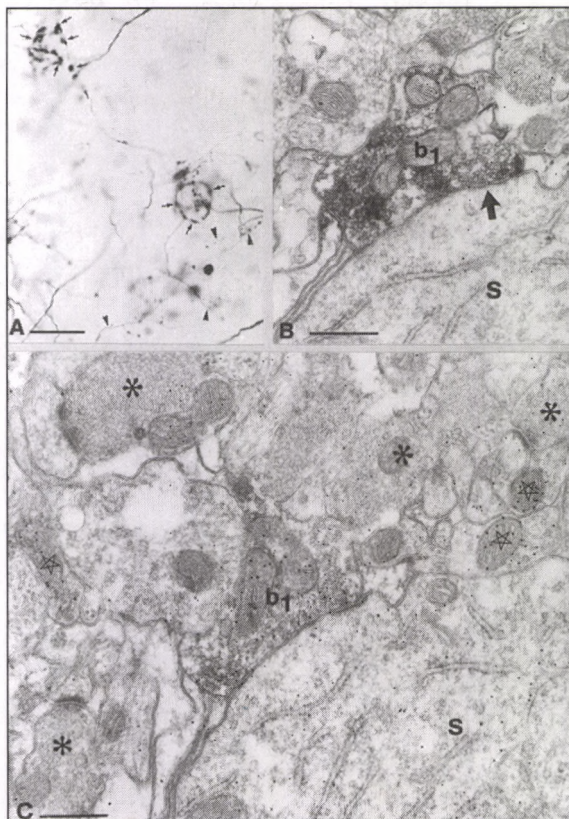




11. ábra. A mediális septumból (MS) érkező GABAerg (A, C) és a median raphe-magból érkező szerotonerg rostok (B) szelektíven idegzik be a hippocampus GABAerg gátló interneuronjait. A pályákat *Phaseolus vulgaris* leucoagglutinin (PHAL) anterográd transzportjával jelöltük meg (fekete színű axonok), míg az interneuronok különböző csoportjait parvalbumin (PV) és calbindin (CB) elleni antiszerummal (barna színű sejtek és dendriték) immunhisztokémiai úton. Az afferens axonok többszörös, kúszórost-szerű kontaktust (nyilak) létesítenek a beidegzett interneuronokkal. Elektron-mikroszkópos felvételek a 12. és 13. ábrákon láthatók. Skálák: A–C, 10  $\mu$ m. (Freund és Antal, 1988; Freund et al., 1990)

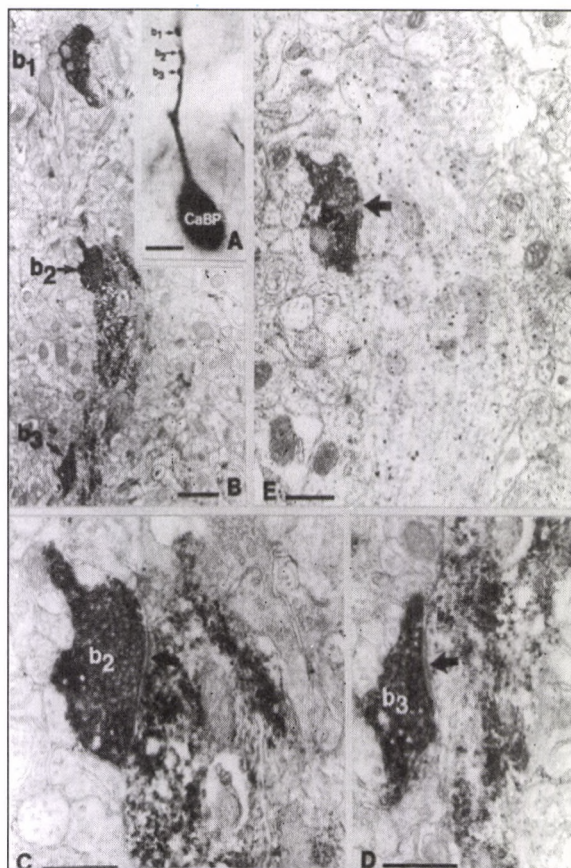


12. ábra. PHAL-jelölt septo-hippocampalis axonok és poszt-szinaptikus elemeik GABAerg voltának igazolása immunogold festéssel. A) A fénymikroszkópos képen a nyilak a pálya egyik komponensét (vastag rostok nagy terminálisokkal) jelölik. B, C) Szomszédos ultravékony met-szetekekről készült elektronmikro-szkópos képek, melyeken jól lát-ható egy szeptális eredetű axon terminalis (b<sub>1</sub>, elektrondenz, mert PHAL-jelölt), amint szinapszt képez egy sejttesttel (S). A C ábrán bemutatott metszeten GABA immunogold festést végeztünk. A kolloid arany-szemcsék akkumulációja jelzi, hogy nemcsak a szeptális termi-nális, hanem posztszinaptikus eleme is GABA-tartalmú. A rekáció specificitását jelzi, hogy az aszimmetrikus szinapsziso-kat adó serkentő (glutamáterg) terminálisok negatívak GABA-ra, azaz nincs bennük arany-szemcse (asteriskek), míg két ismeretlen eredetű GABA-pozitív végződés is megfigyelhető a képen (csillagok). Skálák: A, 20  $\mu$ m; B, C, 0,2  $\mu$ m. (Freund és Antal, 1988)



szabályozásától a motivációs és érzelmi kontrol-lon keresztül a szelektív figyelemig terjed. Ered-ményeink nyomán ismertté vált, hogy ezen kéreg alatti központok egyik fő hatásmechaniz-musa a helyi kérgi gátló interneuronok szelektív serkentése vagy gátlása (Freund és Antal, 1988; Freund et al., 1990; Freund és Meskenaité, 1992). Igazoltuk, hogy a medialis septum thé-ta-frekvenciával tüzelő GABA-tartalmú pace-maker neuronjai a hippocampusban kizárólag gátló interneuronokat idegeznek be (11., 12. áb-rák), és így diszinhibíció (azaz a gátlás gátlása) útján képesek a piramis sejtek nagy populációinak szinkronizálására. A posztszinaptikus interneuronok kö-zött egyaránt szerepeltek periszomatikus és dendritikus gátlást végző in-terneuronok is, a hatás tehát diszinhibíció a piramis sejtek mindkét régiójában.

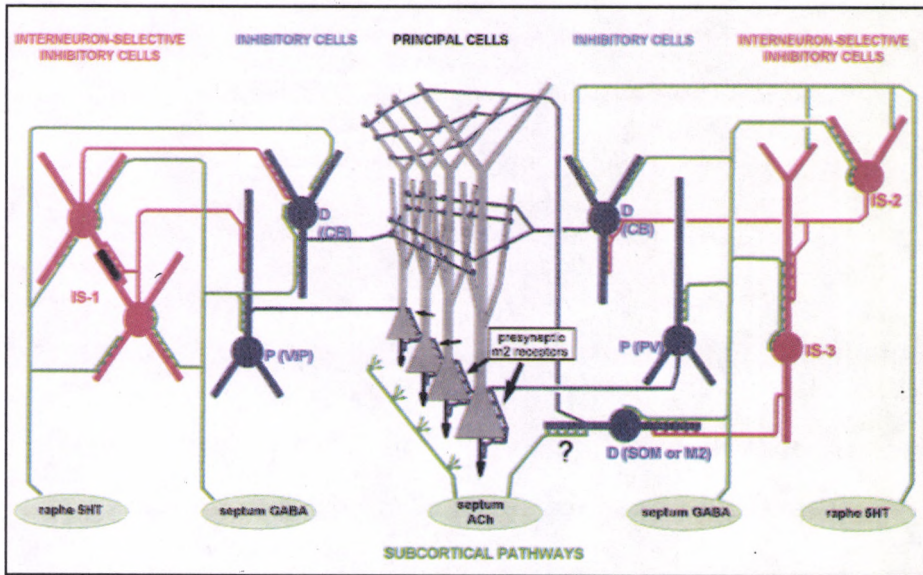




13. ábra. A 11. B ábra anyagából készült korrelált fény (A) és elektronmikroszkópos (B-E) képek. A) PHAL-jelölt raphehippocampalis axon 3 terminálása ( $b_{1-3}$ ) alkot kontaktust egy calbindin-pozitív GABAergic interneuron (CaBP) dendritjével. A három kontaktus kis nagyítású korrelált elektronmikroszkópos képe látható a B ábrán és két végződés ( $b_2$  és  $b_3$ ) által alkotott szinapszis (nyilak) nagy nagyítással a C és D ábrákon. Immunogold festéssel igazoltuk, hogy a calbindin-pozitív sejt, amely a raphe-eredetű szinapszisokat kapta, GABAergic interneuron (lásd arany szemcse-akkumuláció az E ábrán, amely a C-n látott metszet szomszédjáról készült felvétel). Skálák: A, 10  $\mu$ m; B, 1  $\mu$ m; C-E, 0,5  $\mu$ m

A raphe-magokból eredő szerotonin-tartalmú afferentáció gátolja a dendritikus gátlásért felelős interneuronokat szerotonin-1a típusú receptorokon keresztül, viszont serkenti a periszomatikus gátlósejtek egy csoportját (11., 13. ábrák) szerotonin-3 típusú receptoron hatva. Ennek ellenkezőjét produkálja az acetilkolin m2-es (muszkarin típusú) receptorán keresztül, melyről igazoltuk, hogy csökkenti a periszomatikus gátlást, és növeli a dendritikus gátlást (Hájos et al., 1997). A különböző kéreg alatti központok tehát képesek a sejt kimeneti jel generálását (a periszomatikus régióban gátló interneuronokon keresztül), és a bemenő jelek plaszticitását (a dendritikus gátló interneuronokon keresztül), differenciáltan, egymástól függetlenül szabályozni (14. ábra). A kérgi piramissejt-hálózatok így két alapvetően különböző funkcionális állapotban létezhetnek: 1) Ha kicsi a periszomatikus és nagy a dendritikus gátlás (ami egy acetilkolin-hatásnak felelne meg), akkor a sejtek nem emlékeznek, nincs

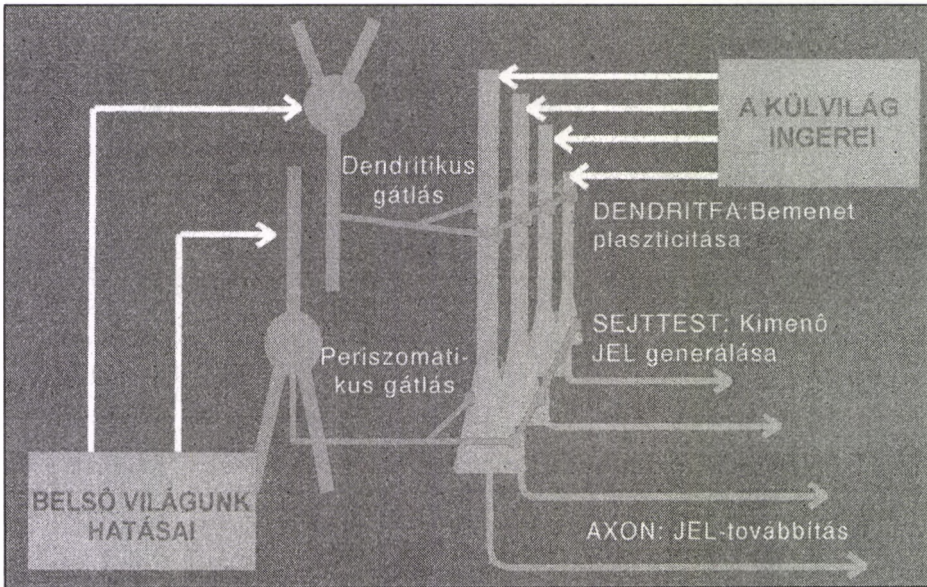




14. ábra. A hippocampus főbb gátlósejtípusainak és subcorticalis kontrollmechanizmusainak sematikus ábrája. A dendritikus [D (CB); D (SOM or M2)] és periszomatikus {P (PV); P (VIP)} gátlást végző interneuronok (kék) mellett a gátlósejteket szelektíven beidegző interneuronok (piros, IS-1, IS-2, IS-3) is láthatók, melyek egymással is gazdag kapcsolatban vannak. A septohippocampalis GABAerg projekció valamennyi interneuron-típust szelektíven beidegzi, míg a raphe-eredetű szerotonerg pálya (raphe 5HT) a calbindin-tartalmú dendritikus {D (CB)} és VIP-tartalmú periszomatikus {P (VIP)} gátlósejtekre specializálódott. A kolinerg szeptális eredetű rostok m2-es receptoraikon keresztül gátolják a GABA-ürülést a periszomatikus gátlósejtek terminálisaiból, ugyanakkor serkentenek egy dendritikus gátlósejt típust {D (SOM or M2)}

szinaptikus plaszticitás, viszont hűséges átkapcsolódó, információ-továbbító funkciót képesek ellátni. Ha fordul a kocka, és a periszomatikus gátlás lesz erős, a dendritikus pedig kisebb (ezt az állapotot a szerotonin-tartalmú pálya aktivitása idézheti elő), akkor alig fognak a piramis sejtek tüzelni, minimális lesz a kimenő jel, viszont az afferens bemenet specifikusan, aktivitásfüggő módon megerősödhet, a sejt tanulni fog. A két funkcionális állapot közötti kapcsoló szerepét a gátló interneuronok töltik be, melyek segítségével belső világunk – motivációs, érzelmi és általános fiziológiai állapotunk – képes megengedő módon szabályozni az egyes tanulási és memóriefolyamatokat, illetve a külvilág ingereire adott válaszokat (15. ábra).



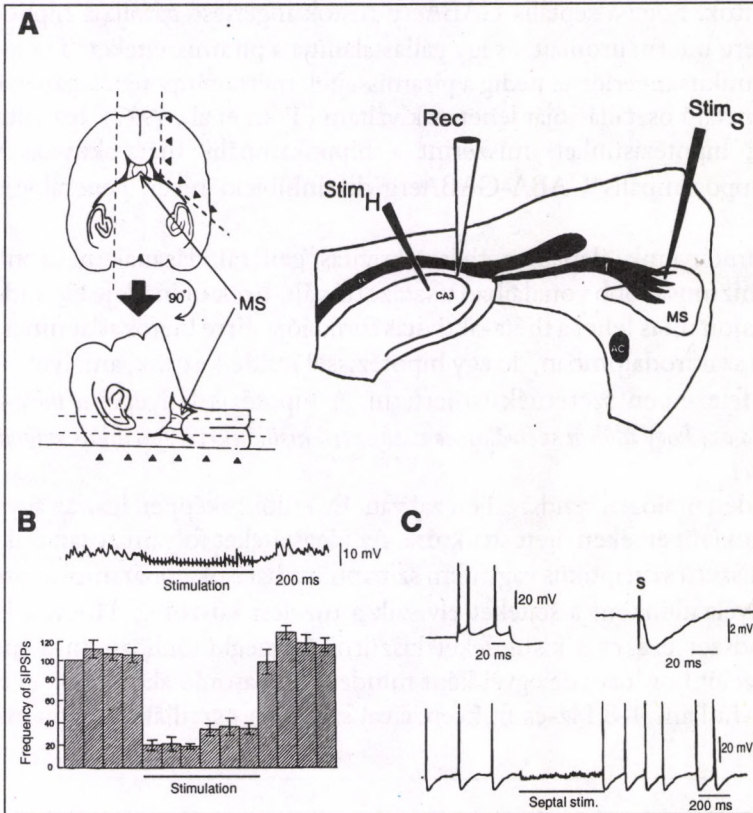


15. ábra. A külvilág ingerei többszörös átkapcsolás után ingerület formájában az agykéreg piramissejtjeit ingerlik, míg a belső világunkból származó információk, úgymint motiváció, érzelmek, általános fiziológiai állapot, az ősi subcorticalis pályákon keresztül érik el az agykérget, és ott elsősorban a különböző gátlósejtípusok modulációján keresztül fejtik ki hatásukat. A periszomatikus és dendritikus gátlás relatív erősségének változtatásával képesek az agykéreg funkcionális állapotát alapvetően befolyásolni, átalakítani egyszerű átkapcsoló-állomásból emlékezőstruktúrává (szerotonerg hatás), vagy éppen fordítva (kolinerg hatás)

## Zajszűrés théta-oszcilláció és visszacsatolósos dendritikus gátlás útján

Anatómiai, neurokémiai vizsgálataink igazolták, hogy a medialis septum GABAerg neuronjai szelektíven idegzik be a hippocampus ugyancsak GABAerg gátló interneuronjait (Freund és Antal, 1988). Ezen eredményeink alapján feltételeztük, hogy a hippocampális théta-aktivitást szeptális GABAerg neuronok indukálják ritmikus diszinhibíció útján (lásd előző fejezet). Hipotézisünk bizonyításához fiziológiailag kellett megvizsgálnunk, hogy a septohippocampalis GABAerg rostok ingerlése valóban gátolja-e a hippocampus interneuronjait. Sikertült egy septohippocampalis *in vitro* szelettechnikát kidolgoznunk, melyben lehetővé vált a pálya szelektív stimulációja, miközben a hippocampus serkentő- és gátlósejteiből intracellulárisan vezethettünk el (16. ábra). Ezzel a módszerrel





16. ábra. Elektrofiziológiai bizonyíték a septohippocampalis GABA-GABAerg gátlástalanításra (diszinhibícióra). A) Az in vitro septohippocampalis szelet készítésének módja. A patkány agyából a szaggatott vonallal jelzett bemetszések után a kieső darabot eltávolítjuk, majd a vonal mentén a törést kiegyenesítjük. Az agyat így felragasztva, a septum, a hippocampus és az őket összekötő pálya egy síkba kerülnek, így a septohippocampalis szelet elkészíthető. B) Jól láthatók a hippocampalis piramisjelekből elvezetett spontán GABAerg potenciálok, melyek a septum stimulációja alatt eltűnnek, azaz a gátlósejtek spontán aktivitását a szeptális GABAerg afferensek stimulációja megszüntette. Az alsó hisztogrammon több sejtől történt regisztrációt összegeztünk. A szeletekben a kolinerg és glutamaterg transzmissziót farmakológiai úton kikapcsoltuk. C) Intracelluláris elvezetés gátlósejtől (azonosítás tüzelés alapján, lásd bal felső ábra). Szeptális ingerlésre a gátlósejtől gátló posztzsinaptikus potenciált vezethettünk el (jobb felső ábra). Amikor gátlósejtünket áraminjekcióval folyamatos tüzelésre bírtuk, szeptális ingerléssel ez a tüzelés felfüggeszthető volt. A septohippocampalis gátlás tehát szelektív az interneuronokra, azok gátlásán keresztül gátlástalanítja a piramisjeleket (Tóth et al., 1997)



kimutattuk, hogy a septalis GABAerg rostok ingerlése gátolja a hippocampus GABAerg interneuronjait, és így gátlástalanítja a piramis sejteket. Théta-mintázatú ritmikus ingerléssel pedig a piramis sejtek membránpotenciáljának hasonló frekvenciájú oszcillációját lehetett kiváltani (Tóth et al., 1997). Igazoltuk tehát korábbi hipotézisünket, miszerint a hippocampális théta-aktivitás valóban septohippocampalis GABA-GABAerg diszinhibíció révén generálódik (17/A ábra).

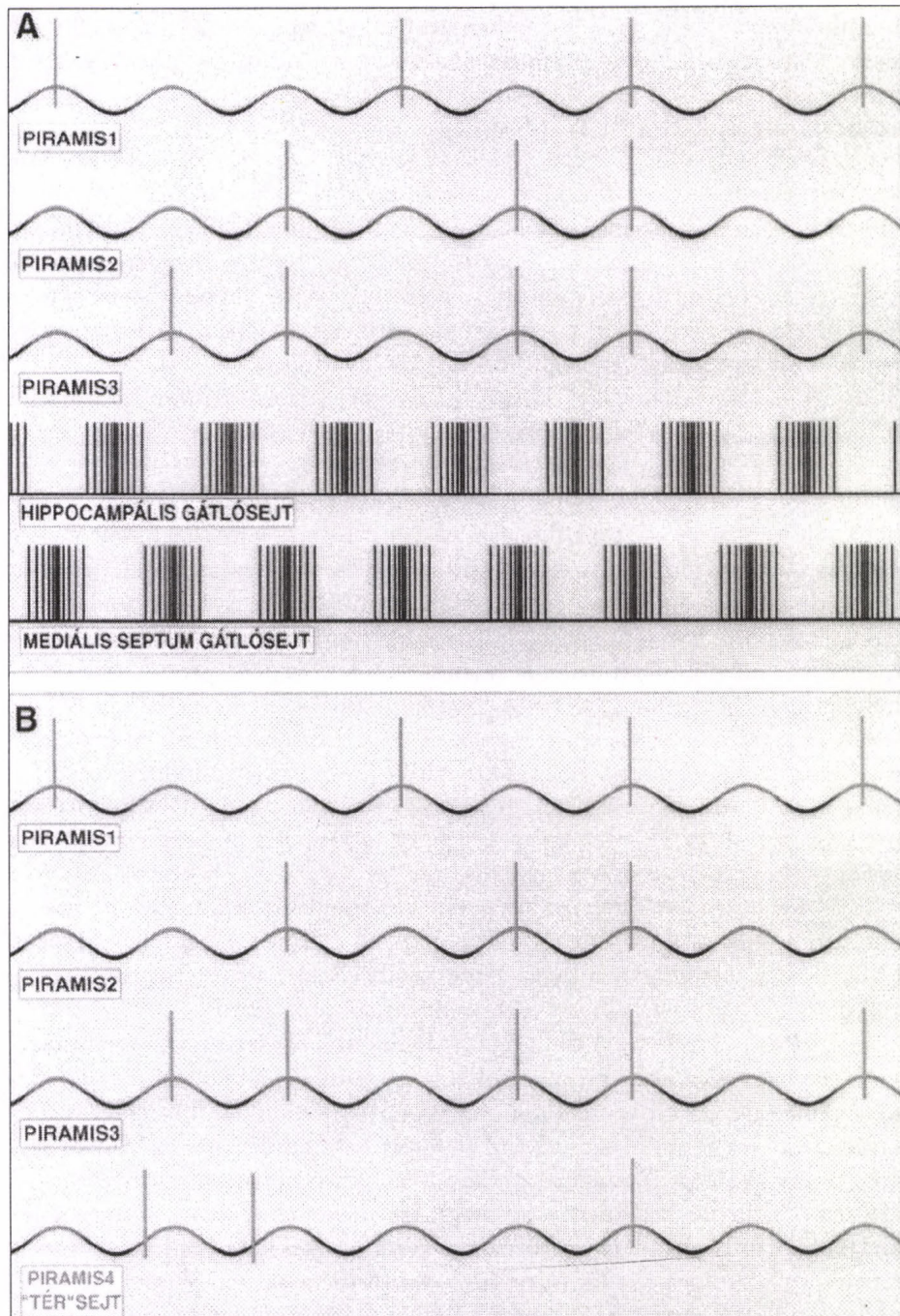
Eredményeink alapján a théta-aktivitás generálódásának neuronhálózati mechanizmusa főbb vonalaiban tisztázottá vált. Ezek után ideje elgondolkozni azon, vajon mi is lehet a théta-aktivitás funkciója. Erre biztos adat nincs a nemzetközi szakirodalomban, de egy hipotézissel rendelkezünk, amelyet az alábbi, utolsó fejezetben szeretnék ismertetni. A hipotézis lényege: *a théta-aktivitás funkciója az, hogy időben szétválassza a zajszerű kisüléseket a specifikus szignáltranszmissziótól.*

Minden biológiai rendszerben zaj van. Ez különösképpen igaz az agyra, mely egy rendkívül érzékenyített struktúra. Az idegsejteket folyamatosan érik különböző zajszerű szinaptikus vagy nem szinaptikus hatások, ionáramokat produkálva, melyek időnként a sejteket elviszik a tüzelési küszöbüg. Hogyan képes az idegrendszer ezeket a kisüléseket kiszűrni és megkülönböztetni a specifikus információt hordozó, de egyébként mindenben hasonló akciós potenciáloktól? A théta-hullám 4–8 Hz-es frekvenciával szinkron oszcillátja a piramis sejtek

17. ábra. A) A théta-aktivitás generációjának mechanizmusa. A piramis sejtek többségének  $\Rightarrow$  membránpotenciálja szinkron oszcillál (4–8 Hz-es frekvenciával), ami a helyi GABAerg gátlósejtek általi periodikus hiperpolarizációjuk eredménye. A helyi gátlósejtek tüzelését pedig az őket szelektíven gátló septális GABAerg pacemaker sejtek teszik ritmikussá. A piramis sejtek kisülése a théta pozitív csúcsa körüli periódusokban a legvalószínűbb, hiszen ekkor vannak legközelebb a tüzelési küszöbüg. A zajhatásra depolarizált sejteket, melyek már közel járnak a tüzelési küszöbüg, az érkező théta-hullámok egyszerre lökik át a küszöbüg, így szinkronizálva a zajt a théta-oszcilláció pozitív csúcsi fázisára.

B) Az a piramis sejt, amelyik specifikus információt hordoz, az többletserkentést kap, így képes előbb is kisülni, a théta-oszcilláció kevésbé depolarizált (azaz erősebb periszinaptikus gátlás alatt álló) fázisában. Erre kísérletes bizonyítékot az ún. térsejtek esetén O'Keefe és munkatársai (1993) szolgáltatnak, a jelenség „phase-precession” (fázis-előretolódás) néven vált ismertté. A zajszerű kisülések tehát időben elválnak a szignáltól, így lehetővé válik a szinaptikus plaszticitás (tanulás) gátlása a zajfázisban és megengedése a szignáltranszmissziós fázisban egy specifikus gátlómechanizmus (visszacsatolásos dendritikus gátlás) által (lásd 18. és 19. ábrák)







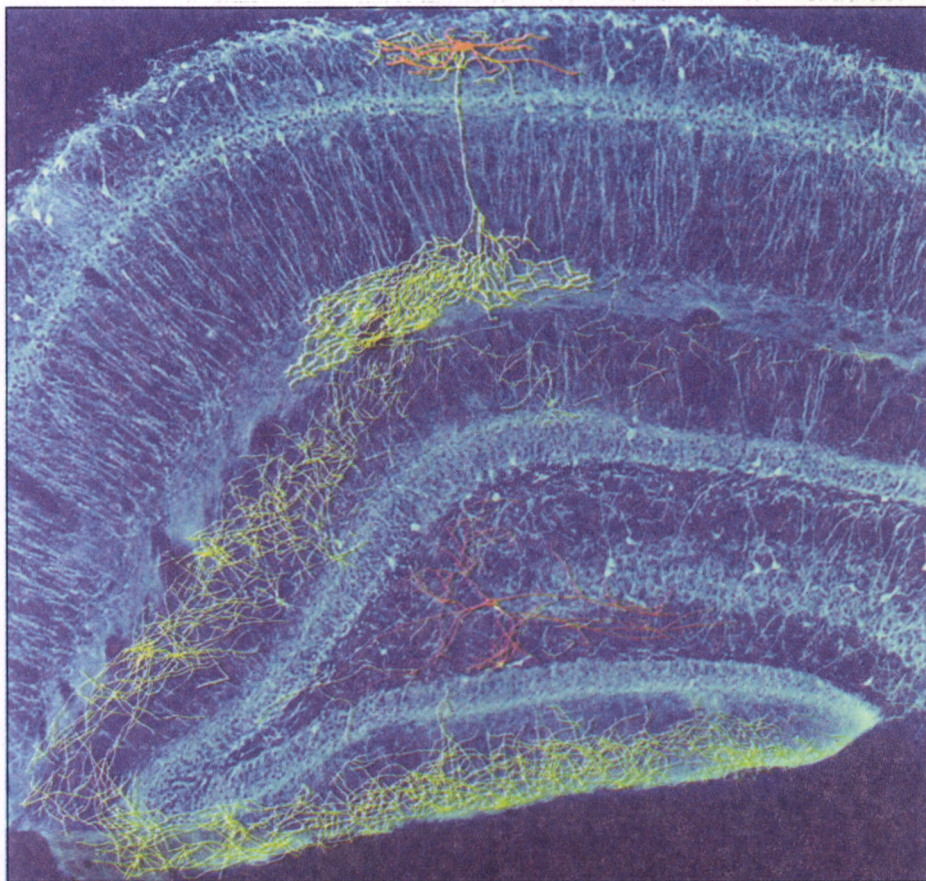
membránpotenciálját, így a periodikusan érkező depolarizáló hullámok egyszerre lökik át a tüzelési küszöbön a már egyébként is akörül tartózkodó sejteket, így szinkronizálódik a zaj a théta pozitív csúcsa körüli időperiódusra. Az a sejt azonban, amelyik specifikus információt hordoz, többletserkentést kap, így képes előbb is kisülni, a théta-oszcilláció kevésbé depolarizált fázisában. Erre kísérletes bizonyítékot az ún. térsejtek (*place cells*) esetén O'Keefe és Recce (1993) szolgáltatottak, a jelenség *phase-precession* (fázis-előretolódás) néven vonult be az irodalomba. Ha az állat a térnek egy bizonyos pontján, az éppen regisztrált sejt térmezejében tartózkodik, megfigyelhető, hogy az adott térsejt intenzíven elkezd tüzelni, de nem a théta pozitív csúcsán, hanem korábban. Megelőzi tehát a háttér- vagy zajkisüléseket produkáló sejteket (17/B ábra).

Miért jó, hogy időben elválasztottuk a szignált a zajtól? Ismert, hogy ha egy idegsejt kisülése egybeesik egy ráérkező serkentő bemenet kisülésével, akkor ez a bemenet tartósan meg fog erősödni (Hebbi-asszociáció). Ez a jelenség jelentős egyszerűsítésekkel a tanulás sejtszintű alapmechanizmusának tekinthető. Nem akarjuk viszont, hogy a zaj mint információ rögzüljön. Ennek megakadályozására fejlődött ki egy gátlósejttípus, a visszacsatolós dendritikus gátlást végző sejtek csoportja (18. ábra). Ezek képesek megakadályozni a tanulást specifikusan a zajfázisban. Igazoltuk, hogy ezek a sejtek serkentő bemenetüket helyi piramis-, illetve szemcsesejtektől kapják, így aktivitásukat a helyi principáissejt-aktivitás határozza meg. Ebből következik, hogy első sorban a théta pozitív csúcsa körül fognak tüzelni, hiszen itt a legnagyobb a piramis sejtek kisülési valószínűsége. Aktivitásuk révén pedig gátlódik az entorhinális eredetű szinapszisok hatékonysága és plaszticitása a disztális dendritfán, még akkor is, ha ezen szinapszisok aktivitása egybeesik a piramis sejtek kisülésével.

A 19. ábra mindkét rajzán az üres szimbólumok az inaktív sejteket jelzik, a teli szimbólumok aktív sejteket jeleznek. Az A és B ábrák bal felső sarkában lévő inzertek jelzik, hogy a théta-oszcilláció mely fázisában (szaggatott vonalak) történő neuronális aktivitást ábrázolja az adott diagram.

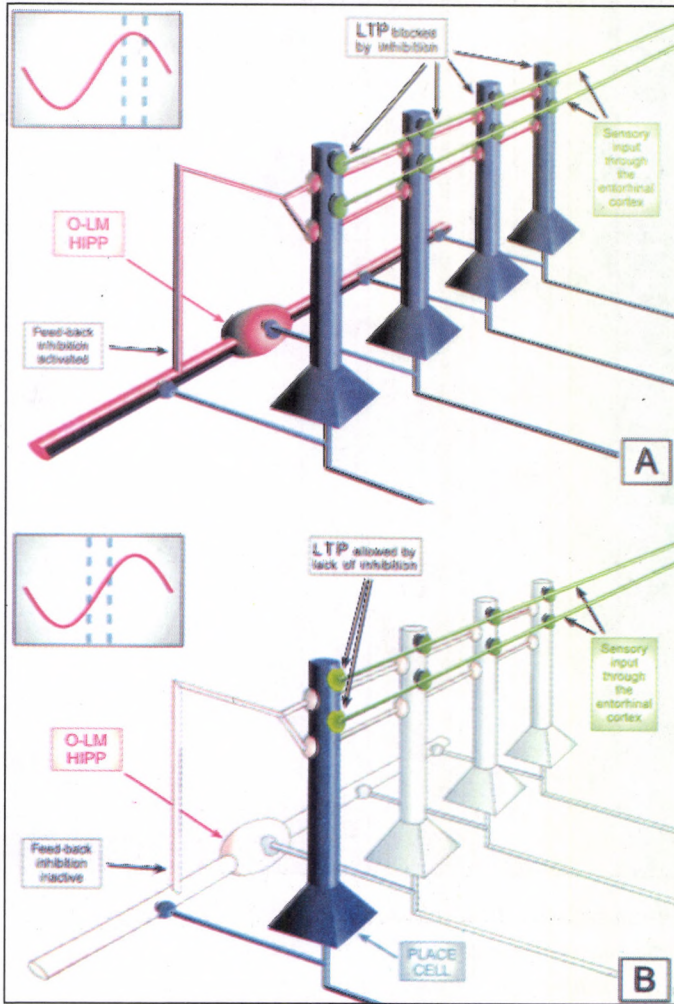
Ha a théta-aktivitás valóban képes időben szétválasztani a szignáltranszmissziót a zajtól, akkor a visszacsatolós dendritikus gátláson keresztül lehetővé válik a tanulási folyamatok limitálása térben és időben. Limitált lesz egy kiválasztott sejtpopulációra, például az adott hely térsejtjeire, és limitált lesz azokra az idő-intervallumokra, amikor specifikus szignáltranszmisszió zajlik (19. ábra). Ez a mechanizmus magyarázhatja a térsejtek receptív térmezejének kialakulását is. Ha az állat új környezetbe kerül, a sejteknek eleinte nincs precíz térmezejük. Exploráció során (amit folyamatos théta-aktivitás kísér) a tér valamely pontjában egyes piramis sejtek véletlenül előbb sülnek ki, mint a többi.





18. ábra. A visszacsatolós dendritikus gátlásért felelős sejtípus egy-egy példánya látható sorozatmetszetekből rekonstruálva a CA1 régióból (O-LM sejt) és a gyrus dentatusból (HIPP sejt). A dendritek lokalizációjából egyértelmű, hogy e sejtípusok fő serkentő bemenete helyi piramis-, illetve szemcsesejtekből ered, míg axonja ugyanezen serkentő principális sejtek disztális dendritjeit idegzi be, még hozzá pontos réteg szerinti átfedésben az entorhinális kéregből érkező (szenzoros információt szállító) serkentő afferensekkel (a rajz dr. Sík Attila munkája)

Így megmenekülnek a visszacsatolós gátlástól, és az abban a pillanatban kisülő (a térnek azt a pontját kódoló) rajtuk végződő entorhinális afferensek szinapszisai meg fognak erősödni. Amint az állat újra abba a térrétegbe megy, megint ugyanazok a piramis sejtek fognak előbb kisülni (*phase-precession*-módban), de ez már nem véletlen, hanem a rajtuk megerősödött szinapszisok révén



képesek erre. Így a visszacsatolós gátlás még kevésbé éri őket, és a rajtuk szinaptizáló entorhinális rostoknak az a csoportja, amely ezt az adott térmezőt kódolja, egyre jobban megerősödhet, a sejt tüzelése egyre előrébb tolódhat a többi sejthez képest (Katona et al., 1999).

Összességében ma már elmondható, hogy értjük a tanulási és memória-folyamatokhoz kapcsolt elektromos aktivitás-mintázatok generálódásának neuronhálózati mechanizmusait, ismerjük a részt vevő sejtek kapcsolódási törvényszerűségeit, interakcióik fiziológiai és neurokémiai tulajdonságait. Hasonló módszerekkel jutottunk közel a tudatos érzékelésben kulcsszerepet ját-



- ⇐ 19. ábra. A) A visszacsatolós dendritikus gátlásért felelős sejtípusok akkor sülnek ki legnagyobb valószínűséggel, amikor a legnagyobb számú, rájuk konvergáló helyi piramis-, illetve szemcsesejt tüzel egyszerre. Ez nyilvánvalóan a theta pozitív csúcsa körüli fázisban, azaz a zajfázisban történik. Az aktivált gátlósejtek pedig megakadályozzák az asszociatív tanulást, azaz hogy a serkentő afferensek kisülése és az általuk beidegzett piramis sejtek zajszerű kisülése véletlenszerű egybeesése tartós szinaptikus megerősödéshez, tanuláshoz vezessen. B) A specifikus szignáltranszmissziós fázisban csak a phase-precession-módban lévő sejtek sülnek ki (lásd 18. ábra), ekkor csak néhány sejt képes tüzelni, ez pedig kevés a visszacsatolós gátlósejtek kisütéséhez. Ha tehát ilyen körülmények között esik egybe egy piramis sejt és egy rajta szinaptizáló entorhinális axon kisülése, akkor ez a szinapszis tartósan meg fog erősödni, ebben a fázisban lehetővé válik a tanulás. (Katona et al., 1999)

szó 40 Hz-es oszcilláció magyarázatához is. Szentágothai János fél évszázaddal ezelőtt írta le a központi idegrendszeri reflexívek működését. Talán sikerült meggyőzőnöm Önöket arról, hogy mára eljutottunk a magasabb rendű idegi folyamatok sejt- és molekuláris szintű mechanizmusainak értelmezéséhez, sőt talán még a tudati jelenségek strukturális hátterébe is bepillantathatunk.

## Köszönetnyilvánítás

Hálás köszönettel tartozom elsősorban atyai mestereimnek, Somogyi Péter és Szentágothai János professzoroknak, akikről nemcsak technikai tudást kaptam, hanem átragadt rám a kutatás mindennapos izgalma, a felfedezés határtalan öröme, az eredmények megbecsülése, és nekik köszönhetem funkcionális látásmódom kialakulását is.

Pályafutásom első tíz évét az Anatómiai Intézetben töltöttem, a Magyar Tudományos Akadémia Neurobiológiai Laboratóriumában, ahol témavezetőimén kívül számos munkatársamnak tartozom köszönettel, a laboratórium akkori megbízott vezetőjének, Hámosi József professzornak, kollégáimnak, tanítványaimnak és azoknak az asszisztenseknek, akik még hallgató koromban tanítottak az anatómiai technikák különböző fortélyaira. Pályafutásom második évtizedét a Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézetben töltöttem és töltöm ma is. Hálás köszönettel tartozom Vizi Szilveszter professzornak, igazgatóknak, akitől minden támogatást megkaptam ahhoz, hogy csoportomat létszámban és felszereltségben is gyorsan fejleszthessem, és a vele való közös kísérletekből, beszélgetéseinkből tudományosan is sokat épültem.

Az eredmények elérésében legközvetlenebb szerepe mai munkatársaimnak, csoportom tagjainak volt, akik szinte kivétel nélkül tanítványaim, egyetemi hallgató koruk óta dolgozunk együtt. Közülük dr. Gulyás Attilát emelném ki,



az asszisztensek közül pedig Borók Erzsébetet, akik legrégebben dolgoznak velem, és a legnagyobb mértékben járultak hozzá a csoport produkciójához. Többi munkatársamnak is rengeteget köszönhetek, dr. Maglóczky Zsófia vezeti az epilepszia-témákat, dr. Acsády László a subcorticalis regulációval, dr. Sík Attila az egyedfejlődéssel, neurokémiaiával, dr. Hájos Norbert a patch clamp elektrofiziológiával kapcsolatos irányvonalakat felügyelik. Többi munkatársam, dr. Tóth Katalin, Katona István, Borhegyi Zsolt, Cs. Papp Edit, dr. Emri Zsuzsa, Arabadzisz Dimitrula, Gulácsi Alexandra és Wittner Luca is jelentős részt vállaltak számos izgalmas közös kísérletből. Köszönöm Goda Győzőnek és Terstyánszky Gábornak az elektronmikroszkópiában és Csapó Istvánnak a fotózásban nyújtott értékes technikai segítségét. Köszönöm a KOKI teljes tudományos, technikai és adminisztratív kollektívájának a támogatást és a kiváló munkahelyi légkört.

Együttműködő partnereim közül Buzsáki György (Rutgers Egyetem, Newark, USA), Mody István (Kaliforniai Egyetem, Los Angeles, USA) és Richard Miles (Pasteur Intézet, Párizs) professzorokat szeretném kiemelni, akikkel nem csupán közös kutatási témáink vannak, hanem több közös pályázatunk is, ami a hazai nehéz anyagi helyzetben meghatározó jelentőségű. Számos munkatársamnak, hallgatónak biztosítottak tanulási, kutatási lehetőséget laboratóriumukban. Valamennyi hazai és külföldi együttműködő partneremnek köszönöm rendkívül értékes hozzájárulásukat, a sok közös eredményt és a tanácsokat.

Végül köszönöm családomnak – feleségemnek, Varga Edinának, szüleimnek és gyermekeimnek – a sok segítséget, megértő támogatást és türelmet, ami lehetővé tette, hogy ezen a pályán elinduljak és meg is maradhassak.

## Irodalom

- Acsády, L., Arabadzisz, D., Freund, T. F. (1996a): Correlated morphological and neurochemical features indentify different subsets of VIP-immunoreactive interneurons in rat hippocampus. *Neuroscience*, 73:299–315.
- Acsády, L., Görcs, T. J., Freund, T. F. (1996b): Different populations of VIP-immunoreactive interneurons are specialized to control pyramidal cells or interneurons in the hippocampus. *Neuroscience*, 73:317–334.
- Bliss, T. V. P., Lomo, T. (1973): Long-lasting potentiation of synaptic transmission in the dentate area of the anaesthetized rabbit following stimulation of the perforant part. *J. Physiol. (London)*, 232:331–356.
- Buzsáki, G. (1986): Hippocampal sharp waves: their origin and significance. *Brain Res.*, 398:242–252.
- Buzsáki, G. (1989): A two-stage model of memory trace formation: a role for „noisy” brain states. *Neuroscience*, 31:551–570.



- Buzsáki, G., Horvath, Z., Urioste, R., Hetke, J., Wise, K. (1992): High-frequency network oscillation in the hippocampus. *Science*, 256:1025–1027.
- Buzsáki, G., Leung, L., Vanderwolf, C. H. (1983): Cellular bases of hippocampal EEG in the behaving rat. *Brain Res. Rev.*, 6:139–171.
- Freund, T. F., Antal, M. (1988): GABA-containing neurons in the septum control inhibitory interneurons in the hippocampus. *Nature*, 336:170–173.
- Freund, T. F., Buzsáki, G. (1996): Interneurons of the hippocampus. *Hippocampus*, 6:345–470.
- Freund, T. F., Gulyás, A. I., Acsády, L., Görcs, T., Tóth, K. (1990c): Serotonergic control of the hippocampus via local inhibitory interneurons. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 87:8501–8505.
- Freund, T. F., Meskenaite, V. (1992): Gamma-aminobutyric acid-containing basal forebrain neurons innervate inhibitory interneurons in the neocortex. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 89:738–742.
- Gray, C., König, P., Engel, A. K., Singer, W. (1989): Oscillatory responses in cat visual cortex exhibit intercolumnar synchronization which reflect global stimulus properties. *Nature*, 338:334–337.
- Gulyás, A. I., Hájos, N., Freund, T. F. (1996): Interneurons containing calretinin are specialized to control other interneurons in the rat hippocampus. *J. Neurosci.*, 16:3397–3411.
- Gulyás, A. I., Miles, R., Sik, A., Tóth, K., Tamamaki, N., Freund, T. F. (1993): Hippocampal pyramidal cells excite inhibitory neurons through a single release site. *Nature*, 366:683–687.
- Hájos, N., Cs. Papp, E., Acsády, L., Levey, A. I., Freund, T. F. (1998): Distinct interneuron types express m<sub>2</sub> muscarinic receptor immunoreactivity on their dendrites or axon terminals in the hippocampus. *Neuroscience*, 82:355–376.
- Katona, I., Acsády, L., Freund, T. F. (1999): Postsynaptic targets of somatostatin-immunoreactive interneurons in the rat hippocampus. *Neuroscience*, 88:37–55.
- Miles, R., Tóth, K., Gulyás, A. I., Hájos, N., Freund, T. F. (1996): Differences between somatic and dendritic inhibition in the hippocampus. *Neuron*, 16:815–823.
- O'Keefe, J., Nadel, L. (1978): *The hippocampus as a cognitive map*. Clarendon, Oxford.
- O'Keefe, J., Recce, M. L. (1993): Phase relationship between hippocampal place units and the EEG theta rhythm. *Hippocampus*, 3:317–330.
- Ramón y Cajal, S. (1911): *Histologie de système nerveux de l'Homme et des vertebres, tome II*. Paris, Maloine.
- Sik, A., Tamamaki, N., Freund, T. F. (1993): Complete axon arborization of a single CA3 pyramidal cell in the rat hippocampus, and its relationship with postsynaptic parvalbumin-containing interneurons. *Eur. J. Neurosci.*, 5:1719–1728.
- Szentágothai, J. (1962): On the synaptology of the cerebral cortex. In: *Structure and function of the nervous system*. (Sarkissov, S. A. ed), Moscow, Medgiz, 6–14.
- Szentágothai, J., Arbib, M. A. (1974): Conceptual models of neural organization. *Neurosci. Res. Prog. Bull.*, 12:307–510.
- Tóth, K., Freund, T. F., Miles, R. (1997): Disinhibition of rat hippocampal pyramidal cells by GABAergic afferents from the septum. *J. Physiol. (London)*, 500:463–474.
- Vizi, E. S., Kiss, J. (1998): Neurochemistry and pharmacology of the major hippocampal transmitter systems: Synaptic and nonsynaptic interactions. *Hippocampus*, 8:566–607.
- Whittington, M. A., Traub, R. D., Jefferys, J. G. (1995): Synchronized oscillation in interneuron networks driven by metabotropic glutamate receptor activation. *Nature*, 373:612–615.





**IX. GAZDASÁG- ÉS JOGTUDOMÁNYOK**  
**OSZTÁLYA**





Sajó András  
az MTA levelező tagja

# A JOGOSULTSÁGOK LEHETŐSÉGE

Elhangzott 1996. október 9-én

„Megtéhetem. Te nem téheted ezt velem.” S különösen: „Az állam ezt nem teheti senkivel!” „Nekem jár!” „Nekem ezzel az állam tartozik!” Két eltérő világnézet, két eltérő világ. Magyarország talán e kettő közt imbolyog.

Az első az egyéni jogosultságok individualista nyelve, a második a szociális járandóságoké. Mindkettő jogosultságra hivatkozik.

Mégis, egészen más társadalmi párbeszéd bontakozik ki e kétféle, bár azonos kifejezéseket használó nyelv szabályai alapján. A kétféle nyelv, a kétféle világnézet eltérő cselekvési programokat diktál. Miféle hatalmi viszonyok érvényesülnek az eltérő nyelvet beszélő állami előírások rendszerében, a tételes jogban? Miféle cselekvési programokat szolgálnak a jogosultságok, mennyiben segítik a *szabadság* megjelenését? Mennyi szabadsághordozó jogosultság fér a jogba, mikor lyukasztja ki annak durva zsákját, mikor fullad bele? Mikor válik a jogilag teremtetten, korántsem pártatlan és elfogulatlan *rend* a jogosultságban hordozott szabadság elnyomójává? Mikor ássa alá a rendet a jogosultság képviselte hatalmasság, pimaszság, önkény, felelőtlenség és szabadosság? És egyáltalán: van-e értelme az egyéni autonómiát vagy legalább határozott várandóságot jelentő jogosultságról, cselekvési programról vagy biztos szolgáltatás reményéről szólni a bizonytalanságokat kezelő posztmodern szabályozás világában? Van-e lehetőség, esély arra, hogy a jogosultságok befolyásolják a jogászai gondolkodást és a társadalmi cselekvést? Van-e lehetősége a jogosultságoknak?

Ezekkel a kérdésekkel foglalkozom az alábbiakban.

## Kételyek

Elöljáróban meg kell vallanom, hogy ez az írás jogosultságokat érintő *kételyekről* szól. Mentségemre szolgáljon, hogy aki nem kételkedik, az talán nem is hisz értelmesen. A ráció korában a hit a szeretett tárgy iránti szkeptikus távolságtartást követel. A kétely az ésszerű hit formája. Azért és annyiban hihetek, amennyiben az, amit szeretnék, nem bukott el végérvényesen az értelem vizsgáján, ámde nélkülözi a racionális bizonyosság megnyugtató érdektelenségét. A jogosultságokat, mint a szabadságra képesítő jogi lehetőséget ismerjük és helyeseljük, mégsem mondhatunk le némi távolságtartásról. A jogosultságok ugyanis a szabadság következményei iránti közönyt szentesítik, s a jogosultságok iránti vakhit és buzgalom anarchiához vagy nevetségességhez vezet.

Egy másfajta kételyről is szeretnék szót ejteni: a hitetlenek cinizmusáról. Ez a hideg hatalom-manipulátorok körében sikkes, de társadalmunk egészétől sem idegen attitűd megfutja a jogok iránti köteles civilizációs tiszteletkört, de nem hajlandó azokat komolyan venni. A jogosultságokat nem tekinti adu ásznak a jogi-szabályozási értékvitákban. Az intézményi, állami cselekvésben az elismert jogosultságok nem számítnak komoly érvnek. A szabadságok érvényesülésének terheit e realpolitikusok nem viselik, és nem hajlandók elismerni se.

A modernitás a pimaszság rendszere: a modernitásban isten, állam, rendőr, tanítás, atyai pofon – a szeretet és annak megvonása is – vitatható és igazolásra szorul. Az államot a hazafiság, az erőfölény, a megszokás, a szakértelem, a demokratikus létrehozás és befolyás nevében igazolják; s mindezen túl jogállamként. A jogállamisághoz nem elegendő, hogy az állam megfelel a saját szabályainak. A porosz formális *Rechtsstaatlichkeit* felett eljárt az idő. A jogállam tiszteletben tartja mások cselekvési lehetőségét. A polgár jogosítványa abban áll, hogy az állam vele bizonyos dolgokat nem tehet meg. Ha az állam terhelni kívánja polgárait, egyre inkább bizonyítani kell, hogy nem sért jogosultságot, hogy egyáltalán joga van szabályozni.

A szabadság elve azt kívánná, hogy az állam csak a szabadság biztosítására lépjen fel szabályozóként, csak a szabadságok érvényesüléséhez szükséges feltételeket biztosítsa. A jogosultság kifejezés hagyományosan az egyén cselekvési *lehetőségét* és ennek érvényesülését jelenti. A jogosultság a szó klasszikus értelmében negatív jog, állami beavatkozásmentességet vagy beavatkozási korlátot hivatott biztosítani.

Ahol a szabadság – a társadalom viszonyainak természete vagy torzultsága miatt – önmaga ellen fordul, ott ezek kiigazítására lép fel a törvényhozó. Ahogy a természetes monopóliumok vagy a szabadpiac működési elégtelenségei ese-



tében. Ám a ténylegesen létező jogállamok rendszerint ennél enyhébb igazoláskritériummal is beérik a korlátozó szabályozáshoz. Mindaz szabályozható, ami a társadalmi rend és béke fenntartásához szükségesnek vagy akár csak hasznosnak minősül. A létező társadalmak létező emberei nem a szabadság elve jegyében cselekvő, önmérsékletre képes, autonóm lények, a szabadság korlátozása tehát mind a társadalmi béke, mind pedig a szabadság érdekében szükséges.

Az állam – a közakarat letéteményeseként és nevében – korlátlan szabályozhatnékban szenved. Ennek az alkotmányos rendszerekben alapvető jogosultságok igyekeznek gátat szabni. A jogosultság a törvényhozó iránytűje: nem annyira abban a ma szokásos és gyanús értelemben, hogy a jogosultságok diktálta értékek szerinti jogrendszert kell a törvényhozónak fejlesztenie, mint inkább abban a megnyugtatóbban minimalista jelentésben, hogy a jogosultságokat *békén kell hagyni*. Ezt a szerepet tulajdonította már az 1789-es francia Alkotmányozó Nemzetgyűlés tagjainak többsége is az emberi jogoknak az Emberi és Polgári Jogok Nyilatkozatában: a Nemzetgyűlésbe szerveződött francia nép azért nyilvánította ki az ember szent jogait, hogy a törvényhozó aktusai szünet nélkül összemérhetők legyenek a jogokkal.

A 18. század végén az alkotmányosság érvényesülését elsősorban a törvényhozás és a végrehajtás közti hatalommegosztástól remélték. Kevésbé tűnt fontosnak, hogy az állam korlátozásában alapjogokra támaszkodjanak, mivel az államnak kevés szabadságkorlátozó eszköz állt rendelkezésére. A szabályozás a jogosultságok érvényesülésének magánformáját szolgálta. A jogosultság itt mindenekelőtt a tulajdonjogot és a szerződés szabadságát jelenti. Ezek nem a törvényhozás korlátjaként, hanem az autonóm cselekvés forrásaként voltak fontosak. A jognak az a dolga, hogy biztosítsa a meglevő tulajdon fölötti szabad rendelkezést és használatot. A jogosultságok a tulajdonon kívül ígéretből származtak. A szerződésben az emberek kötelezettséget vállaltak, a kötelezettség a másik felet feljogosítottá tette.

A magántulajdont minden történelmi korszakban határok közé szorították – legalább a kisajátítás lehetőségének fenntartásával. A szerződési szabadságnak is voltak közrendi korlátai. De mindezen megszorítások a 19. században – legalábbis a későbbiekhez képest – még jelentéktelenek voltak, és kevésbé terheltek a szabadságot. Csak a jóléti igények erősödésével, az állam szociális vállalkásaira tekintettel váltak „behatárolttá” e szabadságok. A folyamat a 19. század végén kezdődött, és az első világháború alatt (pl. lakbérkontroll), majd a világválság idején erősödött föl. A megnövekedett államgépezet élt azzal a korábban a szabadságjogok nevében nem vitatott, de csak szűk körben érvényesített lehetőségével, hogy jóléti, rendészeti megfontolásokból szabályozzon. A 20.



század közepéig alig vonták komoly intézményes jogi korlátok közé az államot. Az amerikai Legfelsőbb Bíróság a New Deal körüli csatát elveszítve egy időre föladata azt az ellenállást, amelyet a századfordulón a szociális törvényhozással szemben tanúsított.

A második világháború után a társadalmakban megszenvedett igazságtalanságból az igazságosság iránti új érzékenység támadt. Az emberi jogok felértékelődtek, a törvényhozás hirtelen készséget árult el az alapvető jogok tiszteletben tartása iránt. A jogosultság-forradalom egyik újabb hulláma csapódott a rendsziklájának. Mivel a náci semmibe vették a szabadságot és az egyenlőséget, a demokrácia híveit – győzelmük után is – tovább hajtotta az antifasiszta harci lendület. Bár a háború után a Nyugat és a Kelet egyaránt a központi tervezés bűvkörébe került, és a jogalkotás a társadalmi jólét mérnökeinek falazóblokkja lett, az emberi jogok szellemét – a 19. századi pozitivista fordulattól eltérően – nem lehetett visszaparancsolni homályos, pókhálós palackjába. „Hiszen – amint Musil írja – mi sem természetesebb, mint hogy a szellemet tekintjük minden létező dolog ... urának. Tanítják is. Aki-ami teheti, szellemmel díszíti, szegélyezi magát.”

A jogrend a mindenkori, gyakran nyíltan represszív politikai hatalom rendje. Amíg – lényegében az ötvenes évekig – a széles tömegeket nem sikerült a politikai rendszerbe kooptálni, és erős volt a társadalmi konfrontáció, addig a politikai hatalom világsszerte keményen válaszolt minden kihívásra. Elég itt a szólásszabadság amerikai értelmezésére utalni: legalább 1951-ig, de inkább az ötvenes évek végéig minden forradalmi propaganda a rendszert veszélyeztetőnek minősült, és mint ilyen, a szólásszabadság nevében védett közlés körén kívül állt. Hasonlóképp hisztérikus, szabadságkorlátozó volt a japán származású amerikaiak internálása a második világháború során. A kollaboráció megelőzésével szemben nem számított az állampolgár szabadsága.

Egyenlőtlen helyzetű személyek közt a szabadság lehetősége kiszolgáltatottságokat és magánelnyomást intézményesít. A klasszikus (negatív) jogosultságok arra a társadalmi következnényeiben ellentmondásos és hipokrita feltevésre épültek, hogy az emberek képesek jogaikat érvényesíteni, képesek élni a szabadsággal – csak az állam hagyjon nekik békét. Az én jogosultságomnak csak más szabadsága és jogosultsága jelentené a határát.

Az emberi jogok tisztelete a tételes jogban civilizációs mércévé vált, s ez alól az 1989 után formálódó demokráciák sem vonhatták ki magukat, még ha 1989 – mint minden forradalom – csak a tagadott régi tartalmak ezer módon való továbbélését szolgálja is. Új meg új jogokról hallani. És mind-mind csillogó szemmel lelkesedő, hivatásos védelmezőkre talál. Ahány új jog, annyi új tan-szék reménye. De legalább egy tisztas megélhetést kínáló nemzetközi konfe-



renciasorozatra futja... Hazai érzékenységeket kerülendő, egy lengyel gyöngyszemre utalnék. A szerző, az Egészségügyi Világszervezet alapokmányára hivatkozva, az egészséget emberi jognak minősíti. Eszerint „[a] legjobb elérhető egészségi állapot minden emberi lény egyik alapvető joga”. A szerző bosszúságára ugyan az államok *kötelezettségeit* megállapító nemzetközi dokumentumok nem említik e jogot, de azért tudósunk – sokadmagával – mégis úgy tesz, mintha elméletileg elfogadott, igazolt jogról értekezne. Elvégre, amint Freud is megfigyelte: „ha túlságosan gyakran ... öntenek szavakba egy-egy emléket, az lassanként sztereotípiává merevedik ... és egyre tovább burjánzik az eredeti rováására”. Vagy a szólásszabadság hirdetői nem ugyanígy jártak-e el olyan korokban, amelyekben a cenzúra helyességéről és szükségességéről majd mindenki meg volt győződve?

### Szabadság vagy szükség

A negatív szabadságjogokkal persze mindig akadtak gondok. Mivel a szegények anyagi okokból nemigen tudnak mit kezdeni absztrakt cselekvési lehetőségekkel, széles rétegek szemében a jogok csak az erőfölény érvényesülési eszközének tűntek. Hiába a választás szabadsága, ha nincs mi között választani. Hiába a jogosultság a bíróság előtti védelemhez a büntetőeljáráásban, ha a szegény ember nem tudja megfizetni az ügyvédet. A jóléti államokban megkísérelték minden politikailag releváns osztály gazdasági és politikai integrációját, amihez az előnyökből eddig nem részesedők „bevonására” volt szükség. Előtérbe került a jogosítványok állami előmozdítása és az állami szociális juttatások intézményesítése.

A fejlettebb piacgazdaságok persze a szociális jogok alapjoggá tételében rendkívül óatosak. A jóléti jogosultságok ugyanis döntő módon befolyásolják a jogosultságok szabadsághordozó képességét. A posztkommunista országokban viszont – mint a magyar példa is mutatja – a szociális alapjogi rendszer kiépítésében igen messzire kívánnak menni. A garantált közepes jólét cselekvési programja azzal jár, hogy a szabadság helyébe az államtól való garantált függőség kerülhet. A vallásszabadság itt már nemcsak azt jelenti, hogy mindenki zavartalanul követheti vallása előírásait egyháza kebelében, hanem azt is, hogy az állam tartja el az egyházat, miáltal a hívő (akár rászorult erre, akár nem) anyagi teherviselés nélkül üdvözülhet. Azt mondják: valahányszor rászorultság jogcímén állami juttatásokat követel valaki, mindjárt jogosultnak mondja magát. A szabadság helyett a *szükség* válik a követelés alapjává, s a szabad, autonóm polgár helyét a rászorult, sőt rászorultnak vélelmezett egyén foglalja el. Állítólag azért járna a támogatásban álló jog, hogy a polgár garantáltan szabad



lehesse. A támogatás szabaddá tesz; a szabadság pedig arra való, hogy a szabad ember demokratikus eszközökkel a támogatottságához ragaszkodjon.

A jogosultságok szemüvegén át a jóléti állam fejőstehénnek látszik. Az állam nyújtson szolgáltatásokat – hangzik a követelés –, aminthogy az állam is e jogosultságokra hivatkozva terheli a megváltozott viszonyok közt polgárait. Az ellátási jogosultságok keresztezik a klasszikus jogosultságok érvényesülését, suksükölnek, belerondítanak a jogosultságok nyelvtanába. A szabadság fontossági sorrendjei összekavarodnak. A jogosultságok bősége a jogosultságok kioltásához vezet. Anyagi erőforrás – és így társadalmi erőfeszítés – sem jut e töméntelen jog érvényesítésére. Az inflálódott jogosultságok közt választani kell – és az állam az, aki választ. A jogosultságok, amelyek történelmileg az állam korlátozását szolgálták, itt az állam mazsolázással megalapozott hatalmát erősítik.

Ahogy azonban a jogosultságok sokasodnak, egyre inkább egymásba is ütköznek. Amikor pedig az állam – a jogokat érvényesítendő – keresztes hadjáratra vállalkozik, akkor a hatóságok a „kevésbé lényeges” jogokon átgázolnak. Történetesen az állam számára kényelmetlen jogok szoktak „kevésbé lényegesnek” minősülni.

A jogosultságok nyelvét beszélő közösségben igazolási szempontból könnyebb egy jogosultság nevében korlátozni egy másik jogot, mintha egyszerűen a közérdekre, a nemzetbiztonságra, az egészségvédelemre hivatkoznának. Ilyenkor a beavatkozás mélyebbre hatol, és intenzívebb. Elegánsabb a besúgókat a személyiségi jogok nevében védelmezni, mint a nemzetbiztonságra hivatkozva. Így nem kell megvallani, miben is áll a nemzetbiztonság, és mennyiben sérülne, ha kiderülne, hogy kik, miként hallgattak le másokat, *anno*.

Az államnak immár kötelessége vagy elismert feladata – vagyis lehetősége –, hogy a szociális jogok mintájára a negatív jogok érvényesülését is biztosítsa a legkülönbözőbb társadalmi viszonyokban – például, hogy „igazi” egyenlőség érvényesüljön.

A jogok állami előmozdításának kétes következményeit a tanszabadság példáján szemléltethetjük. A *tanszabadság* a vállalkozási, cselekvési és szólásszabadság kombinációja. A meghirdetett tanszabadság ellenére az egyetemeket a 19. századi Európában az állam szigorodó felügyelet alatt tartotta. Az államok többnyire monopolizálták is a felsőoktatást, részben azon az alapon, hogy a költségvetés állja a ceket. A tanárok közszolgálatba kerültek. Pedig a felsőoktatás szabadsága azt jelentené, hogy aki akar és képes, az tanulhasson 18 éves kora után, s aki akar – és képes –, tanítsa őket mindenre, ami nem ártalmas. Az állam – e felfogás alapján – a köz védelmében legfeljebb minőség-ellenőrzést végez,



megjelölve, hogy milyen személyi/tárgyi feltételek esetén nevezheti magát egy intézmény egyetemnek. Az ellenőrzés a kimenő termékre, a diák tudására vonatkozik, főleg, ha az egyetem valami közhitelű igazolást akar adni egy olyan képesítésről, melynek birtokában a diplomás rászabadul a közönségre. Ettől a „minőségvédelmi” kérdéstől alapvetően különbözik az, hogy miként juttatható az egyetemre az, aki egyébként anyagi okokból nem engedhetné meg magának a tanulást. Az állam és a társadalom segíthet. Ahol azonban az egyenlősítés és ezzel a jogosultságok kiterjesztése lesz az állam „morális küldetése”, ott megkezdődik az állam jogosultságérvényesítő tevékenykedése, a monopolizálás és jogosultságkorlátozás. A jogosultságok állami szecskázása során a jogosultságok „előmozdítása” az első lépés; a jogosultságok egyenlő élvezetének állítólagos megteremtése a végpont.

Az állam befolyása az egyetemekre nő, de a biztos támogatás pórázára fűzött egyetemnek nem elégedetlenek ezzel. Az állami monopólium megkíméli őket a versenytől. A tanszabadság joga immár csak azt a követelést fejezi ki, hogy mérlegelés nélkül járjon az állami támogatás – mert minden külső ellenőrzés „beleszólás” lenne. Így lesz a cselekvési lehetőségéből és kockázatból a támogatásra jogosítottakat megillető kiváltság, részesedési és részeltetési jog.

A szociális segélyezettek elvonhatatlan jogai kapcsán hasonló viszonyokkal találkozunk. A segélyezettek lemondtak vagy megfosztódtak a cselekvési lehetőségtől, a magánvállalkozás kockázatától, cserébe a státushoz fűződő juttatások joga „jár”.

## A klasszikus jogosultság nyelve

Az eddigieket a szabadsághordozó jogosultságok féltése diktálta. A klasszikus jogosultsági rendszert tekintem a kívánatos jogi rendszer alapkövének. Ez szolgálja az ember nagykorúságát. Az ennek feltevései szerint folytatott jogi diskurzus korlátozza a leginkább az állami önkényt. Összességében költségkímélőbb is, mert ez a költségeket az érintettre terhelő társadalmi szabályozási forma (legalábbis bizonyos gazdasági és intézményi fejlettség mellett).

A jogosultságok ezen előnyei azonban nem szembeötlőek. Csak akkor csillan fel a jogosultság értéke, ha a jogosultságok figyelmen kívül maradásával járó lehetséges igazságtalanságokra pillantunk. Aztán meg a jogosultságok sokszor kellemetlennek tűnnek. A szólásszabadság zavaró, sőt sértő dolgok kimondását teszi lehetővé. A szólásszabadság a közlő, és nem a hallgató s főleg nem az érintett mellett foglal állást. De a szólásszabadság társadalmi előnyei kellően indokolják ezen alapvető jog fenntartását. A demokrácia működéséhez nélkülözhetetlen a politikai véleményformálás, az pedig nincs szabad sajtó nélkül.



Az utilitárius és az emberi autonómiára vonatkozó hivatkozások mellett más, tisztán értéketikai legitimációk is lehetségesek a jogosultságok védelmében. De hogy a jogrendben a jogosultsági nyelvet és az annak megfelelő dialógust az emberi jogok természetjogi elméletére hivatkozva alapozzuk meg, az gyermekded és veszélyes torzításokkal is jár. Hogy az alapvető jogosultságok nem természetjogi jellegű emberi jogok, még nem jelenti azt, hogy ne lehetne a tételes jogot – jelentős mértékben – jogosultsági kategóriákba megszerkeszteni.

Amikor a személyes autonómiát tisztelő társadalmak a jogi szabályozásban (vagy annak meghatározó részei tekintetében) a jogosultságok nyelvét választják, ehhez nem kell elismerniük, hogy a jogosultságok az ember lényegéből vagy az isteni elrendeltetés folytán kötelező előírások. Minden nyelv konvencionális megállapodást feltételez, s a jogosultság konvenciókénti elfogadása esetén hatékony kommunikációt biztosít. A jogosultság a jogi nyelvben sajátos, kitüntetett szerepet játszik: nem igényel további igazolást. Ellenkezőleg, a további jogi előírások és a másodlagos jogosultságok számára maga szolgál igazolásul. A jogosultság e fogalma nem jelenti azt, hogy a jogosultságokra hivatkozás világossá tenné, mi is számít jogosultságnak, vagy hogy a jogosultság ne lenne korlátozható.

A jogosultságok nyelvén megfogalmazott jogrendszer híve nem érzéketlen a jogosultságok köré szerveződő jogi és társadalmi diskurzus és cselekvés korlátai, megértési zavarai és diszfunkcionális társadalmi következményei iránt. A jogrend kínálta szabadság olyan élvezetet kínál, mint amiben a perzsa asszonyok részesülnek abban a háremben, amiről Montesquieu ír: „Ott a kedvtelések is súlyosak s a gyönyörök is szigorúak, és szinte sosem élvezhetik másként, mint a függés és a hatalom jeleként.”

A jogosultságoknak a mainál teljesebb kiépülése sem teremtené meg a létező világok legjobbját. A jogosultsági alapú jogrendszernek azonban kétségtelen előnye, hogy bizonyos – önkényes, illetve állami túlhatalmat eredményező – társadalmi változásokat kizár, illetve megnehezít. Ugyanakkor, mint társadalmi kommunikációs formának, vannak komoly jelentéstorzító hatásai. A jogosultságok nyelve korlátozott társadalmi közlést és költséges cselekvéseket eredményez. Ezek a költségek a posztkommunista átmenet idején különösen magasnak tűnhetnek, ha viszont a társadalom nem vállalja ezt, az hosszú távon kizárja a modernizációt és a felzárkózást.

Az sem tagadható, hogy a jogosultságok jegyében szervezett, illetve ezek algoritmusát követő társadalmi cselekvések meghatározott kimeneteknek kedveznek. E kimenetek minden hatalmi különbségre épülő, hierarchizált társadalomban a *status quo*t segítik. Különösen aggasztó a jogosultságok jóléti



elosztási hatása az olyan átmeneti rendszerekben, ahol az öröklött *status quo* a rendszer saját önmeghatározása szerint is jelentős mértékben illegitim. Ez a helyzet a posztkommunizmusban is. Az új demokráciák a régi uralom tagadásaként jöttek létre, ám a jog uralma a létező jogosítványokat őrzi. A korábbi kedvezményezettek egykor illegitim kiváltságai jogszerű jogosultságként jelennek meg. Az egykori kollaboránsok (és rosszabbak) személyiségi és büntetőeljárás jogainak érvényesítése az előző rendszer felelőseinek személyi biztonságot nyújt. A tulajdonjogok védelme az „eredeti tőkefelhalmozás” kétes figuráit „mossa át”, miközben a legtöbb országban az új jogrendszer a nélkülözéssel és a biztonságvesztéssel azonosul a vesztesek széles tömegei szemében.

Az 1989-ben kezdődött *jogosultság-forradalom* befejezetlen marad; mint homályos terv tovább munkál ugyan, de kényelmes, megnyugtató és megtévesztő szerkezetei mögött változatlanul a mindenkori hatalom diktálta rend és rendetlenség érvényesül.

A társadalmi rend fenntartása erőfeszítést igényel. A rend fenntartása társadalmilag költséges, különösen, ha a jogosultak maguk nem hajlandók a rendet alkotó határokat fenntartani, vagyis a jogosultságok gyakorlásának költségeit magukra vállalni, interiorizálni. A kelet-európai jogrendek egyik legnagyobb nehézsége a jogosultsággyakorlás kultúrájának hiányából adódik. Ezért nem jön létre az önkorlátozás és önmérséklet civilizációja. Egyébként sem lehet illúzióknak a tulajdon szülte szabadság iránt. Ahogy sokunk tanítómesterének, Eörsi Gyulának egyik kedvenc Brecht-idézete mondja: „Mit számít egy bankrablás egy bankalapításhoz képest?”

A szabadságnak sehogy sem akaródzik rendet szülnie. Mit tesz egy tulajdonos, ha azt tapasztalja, hogy joggyakorlásának költségeit másokra vagy a közre terhelheti, mivel a nem tulajdonosok ellenállása, önvédelmi képessége csekély? A tulajdonos élni fog e rövid távú előnnyel. Az ilyen rendetlenségek fokozzák a központi rendfenntartás iránti igényt. Mit követel erre a felingerelt közvélemény? Központilag kényszerítsék ki, hogy a jogosultsággyakorló tisztelje a mások jogát! Szűnjön meg a potyázás! Csakhogy ez a fajta központosított rendfenntartás igen költséges, és az elnyomás lehetőségét hozza magával.

Mivel jogosultsággal elsősorban a tulajdonosok élnek, legyen kutyájuk, házuk vagy olajbehozatali engedélyük, s mivel a tulajdonosok azok, akikről a központi rendfenntartás költségei adók formájában beszédhetők, a dolog elég reménytelennek tűnik. Legalábbis amíg nem éppen ezeket a tulajdonosokat érintik hátrányosan az externalitások. Ha a gazdagok egymás telkére építenek engedély nélkül, ha a kutyatulajdonosok a más kertjét használják kutyafuttatónak, ha a gazdasági cápák egymásnak nem szállítanak, mindezek az anarchisták mindjárt jogpártiak lesznek. De ennek a fordulatnak, a nálunk adott tulajdoni



eloszlási viszonyok és a könnyen elérhető magánrendteremtés előnyei miatt csekély az esélye.

Hegelrel szólva „[a] jog a szabadságra vonatkozik, az ember e legfenségesebb és legszentebb birtokára, és ezt ismernie kell, hogy kötelező erejűnek érezhesse”. De hogy e tudati feltétel teljesülhet-e manapság, az kétséges. Hogy a jogosultsági alapú jogrendszer az államot korlátozza, és elvileg a szabadság lehetőségét kínálja, az elégtelen lehet a jogosultságok társadalmi legitimálásához, ahhoz, hogy a jogosultságok a jogrendszer axiomatikus alapjaként működjenek. A posztkommunista tudatú polgár állampárti, mert az államtól várja ellátását. Ez a jogosultságtudat sajátos torzulásához vezet. „A modern világ elve – vélte Hegel – megköveteli, hogy amit minden embernek el kell ismernie, mint valami jogosult mutatkozzék meg neki.” Ám a szolgáltatást igénylő a maga kiszolgáltatottságát, a személyes helyzetével járó nehézséget (nagy családos, rokkant, munkanélküli) teszi meg ilyen mindenki által elismerendő jogosultságnak. „Szükségem van rá, tehát jár nekem.” Ez a posztoszocialista jogok alapja, amit „szerencsésen” egészít ki az a nézet, miszerint aki nem szorul ilyen járandóságra, az biztosan csaló. Ez a járandósági szemlélet egy szociális-rendi-korporatív jogrendszert és egy atyáskodó államot intézményesít.

## A mese válsága

A jogosultsági nyelvvel kapcsolatban nemcsak ennek jóléti-elosztási és egyéb igazságossági problémáira kell tekintettel lennünk. (Ezek egyébként nemcsak kelet-európai viszonyok közt lehetnek hátrányosak széles tömegek számára.) A jogosultságra épülő jogrendszerrel szemben kifogásolható ennek túlságos individualizmusa. A jogosultságok gyakorlása szembeállítja egymással az embereket, bomlasztja a közösséget, gyengíti a társadalmi kohéziót.

A jogosultsági diskurzusnak még a jogban is megvannak a maga határai. A jog hatására létrejövő cselekvések egy részét nem a jog-kötelesség kettőse dirigálja. „[A] létezés nagyobbik felét nem aktusok, hanem akták teszik” – mondá Musil. A jogosultsági nyelv félrevezető: ott is az egyént teszi felhatalmazottá, ahol a pillanatnyi mérlegelés és a politikai szempontú döntés áll a jogalkotás és a társadalmi megegyezés mögött. A jogosultsági alapú szabályozásnak egy sor életviszony ellenáll. Ez komoly kihívás. Ahová nem jut el a jog fényecskéje, ott a társadalmi viszonyok hierarchizáltak és szabadság nélküliek maradnak, a jogi beavatkozás viszont gyarmatosító hódításnak bizonyulhat. A család a jogi beavatkozással elvesztheti intimitását, és az állam – vagy az uralkodó erkölcs – kiszolgáltatottjává válik. Másrészt jogi beavatkozás nélkül a család elesettjei, a megkínzott gyermekek és a megerőszakolt feleségek védtelenek maradnak.



A kérdés csak az, hogy például a gyermek jogai nevében történő szabályozás ténylegesen javítja-e a családban élő gyermek helyzetét.

Mindezek után mennyiben indokoltak még a jogosultsági szerkezetek ott, ahol *posztmodern társadalmat* emlegetnek, és mennyi az esélye annak, hogy e szerkezetek érvényesüljenek? A posztmodern állapotban – amennyire egy intellektuálisan kicsiholt életérzés fogalmilag megragadható, és amennyiben a relativizmusból egységes fogalom alkotható – a társadalmi viszonyok bonyolultsága a kezelhetőt túllépi, és objektív jelentések helyett eseti konstrukciók adnak értelmet a társadalmi cselekvésnek, melyben összefüggést csak a szerkesztő-formáló elme talál. A posztmodern állapot leírói szerint megismerés helyett csak mesélni lennénk képesek, esetleges valóságokról. A posztmodern állapot már nem konstruált valóság, nem is egyszerűen elbeszélések sorozata, hanem a mese válsága. A jog arról volt hírhedt, hogy csúcsos sisakú (és gumibotos) férfiakat indított cselekvésre, méghozzá lehetőség szerint egységesen kezelt, ellenőrzött, vagyis kanonizált szövegek alapján. Most mindez esetlegeség, *anekdot*, *oral history* lenne: elbeszélés az egységesített normaszövegről, mítosz a jogalkalmazásról.

Mondhatjuk persze, hogy a megismerő tudat, az elkényeztetett, narcisztikus gyermeki intellektus a maga kudarcát tartja a világ kudarcának.

A felvilágosodás dialógusában – mondja Lyotard – egy állítás akkor elfogadható, ha „beillik a racionális szellemek közötti lehetséges összhang perspektívájába”, amilyen például a közösen elfogadott politikai cél. Ilyen cél lehet akár az emberi jogok és az autonómia érvényesülése is. Meglehet, igaza van Lyotard-nak abban, hogy ezek a tényleges diskurzusok – mint a jogosultságokban elbeszélte jog oly korlátozott érvényesülése is mutatja – nem felelnek meg az értelemteni érintkezés követelményeinek. A társalgás kiválasztott és kiváltságos résztvevői elbeszélnek egymás mellett. Nincs meg a racionális szellemek közti, a legitimációhoz szükséges értelemteremtő összhang. Ebből azonban nem következik, hogy fogalmilag is képtelenség lenne a megértés.

Mindenesetre, a modern társadalmak és szabályozórendszereik, így a jog is, sokkal bonyolultabbak, intellektuálisan nehezebben és másképp kezelhetők, mint a modernitás állapotának korában, ahol a jogosultsági cselekvési programok, az egyéni szabadság a jog szerkezetében – a szabadságot kiteljesítő, szinte beavatkozásmentes magánjog és *common law* idején – oly nagy szerepet játszott.

Ahelyett, hogy normatív hittételként ismételnénk Max Weber leírásait, abban a reményben, hogy a valóság majd normatív rendként fogadja el az ő igazságait a kiszámítható és ennyiben racionális jogról, inkább emlékezzünk Weber lidércnyomására, melyben a modernitás kiszámítható jogosultsági szerkezeteit tönkreteszi a materiális igazságosság, a jóléti állam „ajándéka”.



Nézzünk szembe a tapasztalati tényekkel! A jog még ott is csak határozatlanságot és kiszámíthatatlan mértékű beavatkozásigényt szül, ahol a jogosultságok érvényesülését, beavatkozásmentességet ígér. A jog a világ tudományos ihletésű átszervezésének szolgálatába szegődött. A tudomány természeténél fogva fejlődik, az átszervezés folyamatos változtathatóságot és beépítést kíván. A tudományos és technikai fejlődés befogadása a mindenkori *kockázatvállalás* intézményesítését követeli. Mint a német Alkotmánybíróság a Kalkar atomerőmű ügyében kifejtette, a biztonságos emberi élethez való jogba belefér, hogy „az emberi életet biztosítandó – a tudomány és technika mindenkori fejlettsége szerint határozzák meg az atomerőművek biztonsági szintjét. A jog – mint valami kezdő biztosítótársaság – megengedhető kockázatokkal, és nem holmi cselekvési szabadsággal foglalkozik, mivel senki sem akarja – nem is tudja – vállalni a felelősséget a cselekvések megengedéseért vagy a cselekvési szabadság meghagyásáért. A jogalkotó szorong vagy tudatlan, vagy a tudás megszerzése és feldolgozása túl időigényes és ezért túl költséges számára. Még olyan, a szabadságot közvetlenül érintő kérdésben is, mint a rendőrségi fogvatartás, a francia Alkotmánytanács ráhagyta a törvényhozóra, hogy az előbb leszállítsa ennek idejét hat órára, aztán az új kormánytöbbség rendteremtő idegeskedését követően az is megfelelt, ha fölemelték: a kérdés – mondták – közbiztonsági kockázat, s nem a szabadság kérdése.

A modern jogot az elmúlt századokban elvileg a társadalmat átfogó, egységesítő intézményként működtették. Egységes nyelv vagy legalábbis egyetlen nyelvtan volt, a törvény absztrakt szabályai minden helyzetet rendezni kívántak. Most ez kerül veszélybe: mintha a jog megengedné, hogy némi külső, központi ellenőrzés megőrzése mellett az egyes életszférák, a központi hatalom által elismert professzionális és helyi hatalmak a maguk nyelvjátékait űzzék.<sup>1</sup> A jog a mai – vagy harminc éve tartó – posztmodern állapotában odáig jutott, hogy elismeri a maga szétesését. Átengedi a terepet szakmai önszabályozásoknak, miután a tudományosult vagy szakmaivá, szakkérdéssé vált viszonyokat képtelennek bizonyult központilag kezelni. Arról azonban nem mondott le, hogy az alapvető jogok nevében bizonyos átfogó ellenőrzésre ne jelentse be igényét. Sőt, ellentámadásba megy át, a magánviszonyokba is bekúszik, hogy

<sup>1</sup> Az alapvető szabadságok mindenütt érvényesülni hivatottak lettek volna (ezen az alapon, a szerződési szabadság minden életviszonyt átfogó jellege alapján hirdette a múlt században az amerikai Legfelsőbb Bíróság, hogy a kollektív szerződés elfogadhatatlan). A rendi szabályok a 19. században csak zárványként vették, mint a polgári joggal szemben a kereskedelmi jog a hivatásos kereskedők viszonyainak szabályozására vagy az ügyvédekre vonatkozó hivatásrendi szabályok. Csak lassan léptek ezek mellé más privilegizált rendszerek azt követően, hogy az orvosoknak sikerült magukat a tudomány nevében szakmáítani, majd pedig a gazdasági monopolszervezetek elterjedésével.



az alapvető jogok érvényesüljenek. Az egyenlő méltóság elvének a magán-munkaviszonyokat is át kell hatnia. (Az Egyesült Államok fontos kivételével, de ott is csökkenő mértékben.)

A jog elfogadja, hogy a világ kontingenciákból áll, és a társadalmi biztonságot és rendet mint elviselhető kockázatot igyekszik előállítani. Azazhogy még ezt sem teszi, hanem az egyes életszférákra hagyja, hogy saját, elsősorban professzionális szabályaik szerint határozzák meg az elfogadható kockázatvállalás mértékét, amin túl nincs is felelősség.<sup>2</sup>

A folyton változó, bizonytalan kockázat-meghatározási folyamat végeredményéhez legfőljebb utólagos szankciót fűz a jog. A gondatlan veszélyeztetéssért járó büntetési tételről olvashatunk a törvénytárban, de hogy mi a gondatlan veszélyeztetés, azt – hivatásrendi érdekei szerint – minden szakma maga határozza meg. A jog tehát úgy lesz bizonytalanságkezelő, hogy maga a szabályozás csak a kockázatkezelési döntés helyét, esetleg a döntési folyamat egyes elemeit és állami ellenőrzésének határait tartalmazza.

A bizonytalanságkezelés újabb bizonytalanságokat szül. Mivel a szabályozandó helyzeteket túl változékonynak, bonyolultnak és ezek miatt előre láthatatlannak ítélik, előtérbe kerül – a *menet közbeni finanszírozás* mintájára – a menet közbeni konfliktusrendezés és szabályozás. A törvényhozó kihasználja a hitvallássá emelt előre láthatatlanság és objektív bizonytalanság kínálta igazolást. Hogy elkerülje a bírálható, netán szavazatcsökkentő állásfoglalást a vitatott kérdésekben, inkább leadja a döntési jogokat mindenféle professzionális vagy a jogalkotó által létrehozott, ún. „pártatlan” testületnek (ami persze a bürokrácia és a pártok klienseinek ad megélhetési és uralmi lehetőséget). Ezek a testületek azután már nem a jogi dialógus keretei közt okoskodnak, nem a tisztas eljárás feltételei közt döntenek. Vagyis megszabadulnak a jogban levő jogosultsági elemektől.

Az az elbeszélés, amelyben a jog az egyetlen központ, az állam rendjeként jelenik meg, mára hitelét veszítette. A jogi szabályozás egy sor esetben mindössze arra törekszik, hogy biztosítsa közösségek, szervezetek, csoportok, intézmények autonómiáját, azt, hogy magukra nézve önállóan, saját szabályaik szerint hozzanak döntéseket. Az önszabályozó szervezetek, közösségek döntése a részt vevő egyének szabadságát, egyébként elismert jogait érinti, ezért az egyéni jogosultságok nyelve ezzel az önszabályozó nyelvvel könnyen összeütkö-

<sup>2</sup> Az életviszonyok egy része a nemzeti kereteken kívül, felül zajlik. A kódolt telefonok mennyiségi és minőségi okokból is lehallgathatatlanok. Máskor az ellenőrzéssel járó költségek tűnnek elfogadhatatlannak, mint amikor a repülésbiztonságot fokozott műszaki ellenőrzéssel és követelményekkel akarják javítani. Ha a terrorista merényletek elleni védekezés érdekében három órával az indulás előtt kell az utasnak kiérnie a repülőtérré, az utasok egy része rövidebb távokon egyszerűen más közlekedési eszközt választani.



zésbe kerül. Befellegzett volna a jogosultságoknak? Korántsem. A jogosultság nyelvéhez érdek és megszokás egyaránt ragaszkodik. „[Az] emberiség történetében még soha egyetlen mondatot maradéktalanul át nem húztak, de be sem fejeztek, amiből azután a fejlődés ama zavarba ejtő tempója következik, mely csalóka módon hasonlít a szárnyas ökörhöz.” (Musil.) Innen a kísértés a jogosultsági nyelv egyetemes, minden viszonyt átható használatára.<sup>3</sup>

A nem jogosultsági alapú problémamegoldás és konfliktuskezelés előnye viszont, hogy semlegesít. Ha a cigányt nem „faji okokból”, hanem szakképzettség hiányára hivatkozva bocsátják el, mindjárt sikerült eltüntetni a jogsértést. A semlegesítő szakmai diskurzus azonban veszélyes. Elvitatja az egyén személyként való elismerését és – végső fokon – az önrendelkezést és szellemi nagykorúságot. Világosan kitűnik ez abból, ahogy sokfelé az eutanáziát kezelik. Ez nem egyszerűen az élethez és halálhoz való személyes jog, hanem a „helyes orvosi gyakorlat” kérdése, ahol az orvosi szakma a jogilag egyedül elismert döntéshozó. Mi több, a jog azt is tagadja, hogy az orvos döntést hozna életről és halálról: az orvosnak mindössze a szakmailag indokolt kezelést kell választania. Hogy ettől a terminális beteg hamarabb vagy később távozik a szomorúság völgyéből, az *lege artis* kérdés. A terminális beteg, a gépre kapcsolt haldokló nem alanya, pusztán tárgya a folyamatnak. Humánusan kezelt tárgy (jó esetben), de attól csak tárgy marad. A betegjogok esetleges elismerése csak eljárási jellegű jogot ad, tájékoztatást és megszólalási lehetőséget, a megszólalási jog következményei és főleg a döntés terhe nélkül. Az eutanázia jogosultságra épülő jogiasítása – időigényessége miatt is – túl költséges. Amikor a bírósági eljárás lezárul, a beteg már túl sokat szenvedett – vagy rég halott. Az akarat kifejezésére képtelen beteg számára a jogosultságérvényesítés lehetetlen. De az eutanáziához való jog elfogadtatásának legfőbb nehézsége abban áll, hogy a legtöbb társadalom egyszerűen nem kívánja elviselni a jogosultsági alapú döntés morális feszültségét. Holott itt – a halál választásában – mégis a legalapvetőbb egyéni jogról, az élethez való jogról lenne szó.<sup>4</sup>

3 A diák a feleltetéssel és az azt meghatározó tanrenddel szemben jogaira hivatkozik, a munkahelyen az alkalmazott megkövetelné méltósága mint jog diszkriminációmentes tiszteletét, a munkanélküli az egyenlő jog nevében elvitatja a munkaadónak a munkásfelvételkor alkalmazott válogatási szempontjait. De a posztmodern racionalitás keresztezi ezt. Ha a munkáltató a tudományos *management* és munkaerő-politika elveit és szabályait követi, nem lesz nyíltan diszkriminatív: a nem alkalmazás „oka” nem a cigány származás, hanem az alacsonyabb képesítés. Hogy a döntés mögött társadalmi, strukturális egyenlőtlenségek állnak, azzal a semleges, szakmai megközelítésnek nem kell törődnie; ez alól fel van mentve. A vizsga a személytelen képesítés objektív rendszerén alapul, a munkaerő-felvétel „objektív” – a szakértelem hierarchiát igazol.

4 Az eutanázia ugyan az emberi önrendelkezési jog legegyenesebb megnyilvánulása lenne (az öngyilkossággal együtt), de az eutanázia-döntés jogiasítása, különösen pedig jogosultsági nyelvre fordítása a legtöbb modern társadalom számára jelenleg elviselhetetlen morális teher.



Mi az értelme a jogosultságoknak ebben az újfajta kiszolgáltatottságban – amit a géptől függő, a gép nyúlványaként létező beteg példáz? Megítélésem szerint a jogosultság mint bíróilag védett cselekvési lehetőség ellensúlyozhatja a tárggyá lefokozást. Ennek két útja körvonalazódik. Sokszor és sokan a döntéshozatali eljárásban való részvételi, esetleg együttdöntési jogokban, a részvételi jogosultságok erősítésében reménykednek. Mások a hagyományos alapjogokat erősítenék tovább, és a partikularizált döntési helyzetekben az eddiginél nagyobb autonómiát biztosítanának az egyénnek.

A jogosultságra épülő jog az emberiség egyik legnagyobb vívmánya. Mint az emberi tudás minden nagy vívmánya, e szellemi alkotás is hajlamos elbizakodottságra és eredeti érvényességi körén túli terjeszkedésre. Mai jogrendünk alapvető gondja, hogy mennyire lesz képes a szabadság jogrendjévé válni. De amikor ennek útját keressük, nem feledkezhetünk meg a túlzás zsákutcáiról, és nem tagadhatjuk, hogy a szabadság kényelmetlen és költséges, a mai világ pedig hatékonyságban gondolkodik, és hiányzik belőle a szabadság hatékonyságának érvényesüléséhez szükséges kockázatvállalás és türelem. Akik a türelem művészetét gyakorolják, s akiknek ezért külön hálával tartozunk, azok – Gustav Radbruch nyomán – tudják, hogy „...a kultúra türelmes. A technika türelmetlen. A türelmetlenség e kor bélyege és stigmája. A türelem nyeri el a mulandótól a tartós értéket, tartja meg az illanó pillanatot, győz az idő felett, mert nem aggódik, hogy elveszti az időt; az út minden állomásán célban van, és a munkában már a művet élvezzi, ami létrejön. A türelem egyensúly, hit és bizalom.”





Palánkai Tibor

az MTA levelező tagja

# AZ INTEGRÁCIÓ MÉRÉSÉNEK NÉHÁNY ELMÉLETI-STRATÉGIAI KÉRDÉSE

Elhangzott 1996. december 2-án

**M**agyarországon a társadalomban és a főbb politikai erők között többségi konszenzus van arról, hogy az országnak érdeke az euroatlanti intézményekhez való csatlakozás. Ez az érdek politikai és gazdasági egyaránt, legyen szó a belső demokratikus intézmények megszilárdításáról, biztonságunk fokozásáról vagy modernizációs felzárkózásunkról.

A csatlakozáshoz nem elegendő általános stratégiai érdekeinket tisztázni, hanem azokat adott területeken konkrétizálni kell. Ehhez az integrációs folyamat és hatásainak elemzése elengedhetetlen. Az integráció költség-haszon (cost-benefit) mérlegének elkészítése tehát politikai és gyakorlati jelentőségű egyaránt.

Mielőtt a mérés néhány konkrét kérdésére rátérnék, *néhány általános megjegyzést* kell tenni.

1. A politikai megfontolásokhoz és érdekekhez fűződő várakozások és hatások olyan tényezők, amelyek *teljesülése aligha mérhető, különösen nem egzaktan*. A politikatudomány ugyan képes paramétereket adni a „demokratikus intézmények szilárdságához” (koppenhágai kritérium), de a konkrét számszerűsítés

lehetetlen és hiábavaló lenne. A politikai előny-hátrány mérleg esetében legfeljebb rangsorolásra nyílik lehetőség. Más kérdés, hogy az ország biztonságának a növelése például jelentős gazdasági haszonnal járhat (befolyásolhatja a külföldi beruházások alakulását).

*A gazdasági hasznok és költségek bizonyos területeken egyáltalán nem mérhetőek.* Ez részben értelmetlen vagy lehetetlen lenne. Nemrégiben egy felmérés kimutatta, hogy a magyar lakosság több mint 60%-a azért igenli az ország EU-tagságát, mert nagy várakozásokat fűz a szabad munkaerőmozgás adta lehetőségekhez. (Zárójelben jegyzem meg, lehet, hogy éppen ez a várakozás egyhamar nem teljesül, de előbb-utóbb igen.) Az egyén számára megnövekedett gazdálkodási mozgástér akár munkavállalóként, akár vállalkozóként, a gazdasági szabadság kitágult határai, amit ma már az egységes belső piac ígér, olyan kihívás és vonzerő, amely nagyban befolyásolja véleményét.

Kevés szó esik róla, de hasonlóan fontos motiváló szempont lehet bejutásunk egy alacsony inflációs övezetbe. Nekünk az EU- és később az EMU-tagságunk éppen azt jelentheti, hogy részévé válunk egy stabil valutájú övezetnek. Ezt persze nem „kapjuk” „olcsón”. De magunknak valószínűleg még többre kerülné, s talán meg sem tudnánk egykönnyen valósítani.

2. Bizonyos hatásokat *számba tudunk venni*, sőt azokat *pontosan azonosítani tudjuk*, de *konkrétan nem lehet őket számszerűsíteni*. Ilyenek lehetnek a piaci liberalizálás következtében gyorsuló technikai haladás, a minőség javulása, a fogyasztói választék bővülése vagy a szállítási idők rövidülésének előnyei (pl. a határformálisok eltörlése miatt a külföldi partnerek „just in time” készletezésekre való bevonása).

Máskor a folyamatok komplexitása miatt ütközik nehézségekbe a számszerűsítés (pl. a vámunió és a közös piac hatása a gazdasági növekedésére vagy az EMS inflációmérsekelő hatásának azonosítása).

3. A hatások mérésénél külön kell vizsgálni *az integráció egyes szereplőit*. Az előnyök és hátrányok az egyének, a vállalatok, az egyes szektorok és a nemzetgazdaság szintjén különbözőképpen alakulhatnak. Lehetséges, hogy a nemzetgazdaság számára a mérleg pozitív, de a különböző területeken nagy tömegű lehet az egyéni vesztesek száma. A döntéseknél könnyen előfordulhat, hogy az erős alkupozícióval rendelkező szektorok vagy csoportok érdekei érvényesülhetnek, s adott esetben ellentétes eredménnyel, mint amit a hatások ország-mérlege indikálna, vagy az ország érdeke diktálna.

4. Viszonylag kifinomult mérési módszerekkel leginkább *a piaci formákkal*, főként a vámunióval kapcsolatban rendelkezünk. Kevésbé lehetséges *a gazdaságpolitikai hatások elemzése*. Ezek közül különösen a költségvetési hatásokról vannak konkrét számítások. Az előírások egyszerűsítése a termelési költségek



csökkentésében fejeződik ki. Majdnem lehetetlen a gazdaságpolitikai koordinációk hozadékának az azonosítása.

5. Hiba lenne a hatásmérlegek készítését túlzottan a költségvetési transzferekre szűkíteni. Sajnos ezúttal is *kísért a költségvetési szemlélet*. A költségvetési transzferek és azok mérlege az előnyöknek csak egy nagyon szűk szegmensét képezik. Végtes hiba lenne, ha a döntéseket érdemükön felül befolyásolnák, bármelyik oldalon. A legnagyobb veszély az EU részéről fenyeget, hogy „túlzottan költségesnek” ítélik a kibővítéseket, s az EU szempontjából egyébként jelentős előnyöket figyelmen kívül hagyják.

6. Az előnyök és hátrányok, a hasznok és a költségek nem elemezhetők statikusan önmagukban. Azok *politikafüggőek*. Adott hatások több scenárióban vizsgálhatók, annak függvényében, hogy milyen prioritások és milyen hatékonyság mellett kerülnek végrehajtásra. A hatásokat jó vagy rossz gazdaságpolitikával jelentősen lehet befolyásolni, a költségeket leszorítani, a hasznokat maximálni.

7. Feltétlenül meg kell különböztetni a *rövidebb és hosszabb távú hatásokat*. Elképzelhető és valószínű, hogy rövid távon a stabilizáció vagy az integráció mérlege negatív, de a hosszabb távú hatások ezért bőven kompenzálhatnak.

8. Az integrációs hatások alakulása nagyban függ a *konjunkturális feltételektől*. Az integrációs folyamatot az 1960-as években kedvezően befolyásolta, hogy az kedvező konjunkturális körülmények között ment végbe. Később a hosszabb recesszió (pl. 1973 és 1983 között) az integrációs folyamatokban – legalábbis a kereskedelem szempontjából – komoly zavarokat okozott. Ugyanakkor a válság által generált rekonstrukciós kényszerek a vállalati szférában gyorsították az integrációt.

9. Az előnyök az integrációból részben lehetnek *közvetlenek*, mint például a piacnyitásból származó kereskedelemnövekedés vagy az előírások egyszerűsítéséből származó termelési költség-csökkenés. Más előnyök csak *közvetetten* jelennek meg. Ilyenek azok a hatékonysági és jóléti előnyök, amelyek a nagyobb piacokból, a méretgazdaságosság kihasználásából vagy az intenzívebb versenyből származnak.

10. A mérhető előnyök lehetnek minimálisak, vagy adott esetben a mérlegük lehet negatív, az integrációnak a hatása mégis lehet pozitív. Integráció híján ugyanis a negatív következmények még súlyosabbak lehetnek volna. Ezért feltétlenül indokolt a „nem integrációs” *alternatívának* a költség-haszon elemzése.

11. Korántsem biztos, hogy a várt előnyök *kis és nyitott gazdaság* esetében végül az országokon belül realizálódnak. A vámleépítések növelik a jövedelmezőséget, amin az exportőr és az importőr cégek osztozkodhatnak. Hogy ki realizálja, erőviszonyok kérdése. A csatlakozás számos területen a belső árak csökkenését hoz-

hatja. Hogy ez ténylegesen lecsapódik-e a fogyasztónál, vagy a külföldi beszállító cégek vagy a nagykereskedelem árrését növeli, sok tényezőtől függ. A külföldi beruházások magas nyereségráta mellett úgy „térülhetnek meg”, hogy rövid idő alatt a befektetett tőke többszöröse hagyhatja el az országot.

12. Az integráció mérésével kapcsolatosan *számos módszertani probléma* vetethető fel. A nehézségek már bizonyos folyamatok pontos mérésével kezdődnek. Azután a mérési módszerek is vitathatóak. A kontexusok miatt gyakran a tényleges hatások nem szűrhetők ki. A folyamatokat a maguk komplexitásában kell közelíteni, de ez a mérést rendkívüli módon megnehezítheti.

## Mit kell mérni?

1. A felkészülés és az alkalmazkodás költségei.
2. Az integráció-érettség mérése.
  - 2.1. A fejlettségi színvonalak.
  - 2.2. Az átalakulás szükséges mértéke (Közép- és Kelet-Európában különös relevanciája van). A koppenhágai kritériumok ezt mint a „működő piacgazdaság” követelményét határozzák meg.
  - 2.3. A versenyképesség bizonyos mértéke, vagy ahogy a koppenhágai kritériumok fogalmaznak, képesség a „verseny nyomásának kivédésére” (meeting competitive pressures).
  - 2.4. A stabilitás vagy stabilizáció bizonyos mértéke.
  - 2.5. Az intézményi és jogrendszer harmonizációja és alkalmazkodása. Az 1995-ös madridi tanácsülés sokak szerint új kritériumként határozta meg „az adminisztratív struktúrák alkalmazkodását” (the adjustment of their administrative structures).
3. Az integrációs folyamat előnyei és hátrányai.
  - 3.1. Kereskedelmi hatások. Kereskedelemteremtés és eltérítés.
  - 3.2. Versenyhatások.
  - 3.3. Méretgazdasági előnyök.
  - 3.4. Strukturális hatások.
  - 3.5. Növekedési hatások.
  - 3.6. Fogyasztói hatások.
  - 3.7. Foglalkoztatási hatások.
  - 3.8. A regionális hatások mérése.
  - 3.9. Gazdaságpolitikai (pl. költségvetési) hatások.
  - 3.10. A társadalmi vagy szociológiai hatások mérése. Az integráció nyerteseinek és veszteségeinek azonosítása.
4. Az integráltság, az integráció állásának vagy állapotának a mérése.



## A felkészülés és alkalmazkodás költség-haszon mérlege

Két általános megjegyzést kívánok mindössze tenni.

1. Az átalakulás és a stabilizáció feladatait mindenképpen el kell végeznünk, hiszen a globális világgazdaságból származó kényszerek ezt elkerülhetetlenné teszik. Azok az intézményi és jogharmonizációs feladatok, amelyeket az EU-tagságra való felkészülés érdekében kell végrehajtani, járhatnak többletköltségekkel, de előnyeik mindenképpen nagyobbak, mint hátrányaik.

2. Az integrációra való felkészülés, annak viszonylag szoros határidői olyan kényszert jelenthetnek, ami ezeket a folyamatokat erősítheti és gyorsíthatja, nem engedi meg az esetenként fájdalmas intézkedések halogatását, a feladatok a végrehajtását feszítettebbé teszi. *Az integrációra való felkészülés hozadékát* valahol ebben az összefüggésben kell keresni.

## Az integráció-érettség mérése

Az integráció-érettségre vonatkozóan korábban viszonylag kevés elképzeléssel rendelkezünk. Az EU az 1993. júniusi koppenhágai tanácsülésén a középkelet-európai országok számára tagsági kritériumokat szabott meg. Az integráció-érettség értelmezése és mérése szempontjából elsősorban ezeket használhatjuk.

### 1. Fejlettségi színvonalak

Az integráció-érettség szempontjából kézenfekvő, hogy *a gazdasági fejlettségi színvonalnak* kiemelt jelentősége van. A korábbi csatlakozásoknál ezt konkrétan nem tették megfontolás tárgyává, részben azért, mert az új tagok *fejlettségük*nél fogva megfeleltek az alapvető követelményeknek, vagy mint a mediterrán kibővüléseknél történt, a politikai megfontolások a gazdasági gyengeségekkel kapcsolatos fenntartásokat háttérbe szorították.

Most, hogy az újonnan jelentkező országok közepesen fejlettek, a fejlettség kérdése az EU-ban is előtérbe került. Mivel a keleti irányú kibővítés politikai kérdés, konkrétan nem merül fel ezúttal sem, hogy van-e olyan minimális fejlettségi színvonal, ami kizárná bármely ország tagságát. Másrészt, mivel a Strukturális Alapokkal kapcsolatos igényjogosultságot az 1 főre eső jövedelmek alapján határozzák meg, a tényleges mérlegelésnél közvetetten ez nyilván mégis komoly súlylat esik latba.

Az első körben számításba jöhető CEFTA 5-ök fejlettségük alapján nem térnek el érdemben az 1980-as években csatlakozott mediterrán országoktól.

Szlovénia, a Cseh Köztársaság, Magyarország, Szlovákia és Lengyelország 1 főre eső nemzeti jövedelme az 1997. évi adatok szerint a 7 és 13 ezer ECU (euró) közötti sávban helyezkedik el. Ez nagyjából megfelel a görög és a portugál színvonalnak, valamint a csatlakozás előtti Spanyolország egy főre eső jövedelmének (mintegy 8–9 ezer dollár).

A három mediterrán ország a mintegy 60 millió lakosával nagyságrendileg is megegyezik a CEFTA 5-ökével (mintegy 66 millió fő). Az EK az 1980-as években az újonnan csatlakozók hasonló blokkját egyszer már képes volt integrálni. Az azóta továbbfejlődött és 3 újabb magasan fejlett országgal kibővült Unió feltételezhetően ezúttal is képes erre.

A többi potenciális csatlakozó a 4-5 ezer ECU-s 1 főre eső jövedelemszintjével, tekintettel a többi fejlettségi paraméterre is, minden bizonnyal *eltérő minőséget képvisel* az integráció szempontjából. Az egyik tényező, aminek alapján feltételezhető, hogy a kibővülés több hullámban történik majd.

## 2. A „működő piacgazdaság” kialakítása

Közép-Kelet-Európával kapcsolatosan új mozzanat a „működő piacgazdaság” (functioning market economy) követelményének bevezetése, ami gyakorlatilag az *átalakulás egy bizonyos szintjét* kísérli megfogalmazni ezekkel az országokkal szemben.

A piacok hatékony működését a közgazdasági elmélet az árliberalizálás mértékével, az árak áttekinthetőségével és a külső árakhoz való viszonyával, a piaci szereplők sokaságával, a piacra lépés szabadságával, kereslet és a kínálat vonatkozásában a választás szabadságával, a stabil pénzügyi viszonyokkal, benne a konvertibilitás állapotával, a szociális támogatások és a teljesítményfüggő jövedelemelosztás megkülönböztetésével méri. Hasonló alapokon az elmúlt években az átalakulás elemzése kapcsán az EBRD és a Világbank tett kísérletet a piacosítás komplex paramétereinek a kidolgozására.

Az EBRD az országokat 1-től 5-ig terjedő skálán osztályozza. Magyarország 1996-ban 4-es osztályzatot kapott a kis és a nagy privatizáció, a kereskedelmi és árfolyamrendszer, valamint a beruházások jogi szabályozásának kiterjedtsége és hatékonysága tekintetében. Hármass osztályzata van a vállalati rekonstrukciók, az árliberalizálás, a versenypolitika, a bankreform és a kamatliberalizálás, valamint az értékpapírpiacon és a nem banki pénzügyi intézmények tekintetében, de ezekben egyik kelet-közép-európai partnere sem érdemelte ki a jobb osztályzatot.<sup>1</sup>

1 The 1996 Transition Report. EBRD, London, 1996. 216 p.



A Világbank a piaci liberalizálás mértékét 10-es skálán méri. Magyarország osztályzata 9-es, s ennél csekély mértékben jobbat a Cseh Köztársaság és Észtország, valamivel kevesebbet pedig Lengyelország kapott.<sup>2</sup> Ha a piacgazdaság kiépítésének *tartalmi mélységét* vesszük, Magyarország mindenképpen őrzi vezető szerepét a régióban.

Magyarország a „működő piacgazdaság” követelményének *formálisan* már most is megfelel. Feltételezhetjük, hogy nem sokkal kevésbé, mint Portugália vagy Görögország. Ha befejeződik a privatizáció, átalakul a bankrendszer, megtörténik a közszolgáltató szféra és az államháztartás reformja, akkor még inkább így lesz.

Hogy ténylegesen megfelel-e, az más kérdés. Igazából más országok sem felelnek meg. Egyrészt tisztán piaci viszonyok sohasem léteztek, másrészt nemcsak Közép-Kelet-Európában, bár ott különösen, több okból is a piac deformálódásának lehetünk tanúi.

A piaci deformáció a mai világgazdaságban részben következik a *globalizálódás anomáliáiból*. A globalizálódás következménye, hogy a forrás-allokáció, a munkamegosztás fő vonalai (pl. kooperációspartner-választás), a piacra jutás feltételei átkerültek a transznacionális vállalatok döntési központjaiba. A globális vállalatok forrásokat transzferálhatnak vagy éppen lecsapolhatják egy ország nemzeti jövedelmét, meghatározhatják az adott ország felzárkózását vagy lemaradását. A nemzetgazdaságok autonómiája ezáltal jelentősen zsugorodott.

Az elmúlt 10–15 évben a globális pénzüi piacok óriási mértékű felduzzadásának voltunk tanúi. Ennek eredményeként a pénzügyi folyamatok regulációja kikerült a nemzeti államok hatásköréből, s azt nem sikerült érdemi nemzetközi intézményi keretekkel helyettesíteni. Ez nagyban növelte a pénzüi piacok sebezhetőségét.

Másrészt Kelet-Közép-Európában a piaci deformációk kapcsolódnak az *átalakulás folyamatához*. Az „átalakulási recesszió” körülményei között a magas infláció vagy a termelők tömeges leépülése mellett aligha várható az optimális forrás-allokáció és a gazdaság hatékony működése. A tervgazdaságról való áttérés, különösen a válság időszakában, így ez ideig nem hozta azokat a hatékonysági és jóléti előnyöket, amelyeket eredetileg vártak tőle.

Az átalakuló országok *modellzavarba kerültek*. Ugyan Magyarországon a főbb politikai erők között többé-kevésbé egyetértés alakult ki, hogy az európai szociális (öko-szociális) piacgazdaságot kell megcélózni, de ez ideig vélt vagy

<sup>2</sup> *From Plan to Market. World Development Report 1996.* Oxford University Press, World Bank, Washington, 1996.



tényleges külső nyomásra (Világbank vagy IMF) inkább csak az amerikai konzervatív-liberális monetarizmus dogmatizált modelljének elemeit alkalmaztuk, többnyire öletszerűen. A fekete vagy szürke gazdaság túlzott aránya vagy a gazdaság kriminalizálódása és demoralizálódása súlyos piaci torzulások forrása. Továbbra is fejletlenek a modern piaci infrastruktúrák (hitelkártyák, pénzformák, a globális hálózatokban való részvétel logisztikai struktúrái).

A tervgazdasági modell indokolt deregulációja ez ideig vadkapitalista modellbe torkollott. A társadalmi szabályozás formáit nem sikerült megtalálni. Pedig a szociális piacgazdaság alapvetően szabályozott piacgazdaság, mégpedig „társadalmilag” szabályozott piacgazdaság, amiben az állam mellett olyan regulációs szereplőkkel kell számolni, mint a munkaadók (kamarák, vállalkozói szövetségek), a szakszervezetek, a fogyasztói társulások, a környezetvédők vagy helyi szerveződések érdekérvényesítése.

A „működő piacgazdaság” mindezekben az összefüggésekben nem abban az értelemben csatlakozási feltétel, hogy felvételt nyerünk-e vagy sem. Sokkal inkább arról van szó, hogy *ki tudjuk-e használni az integráció nyújtotta előnyöket*, s nem kerülünk-e kedvezőtlenebb helyzetbe, mint a csatlakozás híján. Ha nem következik be a ténylegesen „működő” piacgazdaság kiépítése, akkor fennáll a veszélye, hogy a gazdaság megmarad a jövőben is szuboptimális szinten, rossz lesz a források kihasználása, állandósul a forrásvesztés, és nem valósul meg a magyar gazdaság modernizációja.

### 3. Versenyképesség

A koppenhágai kritérium, miszerint a közép-kelet-európai országoknak képesnek kell lenniük a „verseny nyomásával” szembeni helytállásra, gyakorlatilag sajátos *versenyképességi követelményeket* fogalmaz meg. Ezek egyik oldalról magától értetődőek, másrészt mind módszertanilag, mind gyakorlatilag nehezen értelmezhetőek.

Nem vitás, hogy az integráció előnyeit nem tudjuk kihasználni, ha nem rendelkezünk a piaci versenyben helytállni képes vállalati struktúrával. Ez jelenthet korszerű temékeket, valamint a költség- és minőségi versenyben való helytállást. A versenyképesség ezért alapvető érdekünk, hiszen egyébként a verseny nagy méretekben söpörheti ki a piacról a vállalatainkat.

Vitatott kérdés viszont, *hogyan lehet a versenyképességet mérni?*

A versenyképesség mérésére és az országgrangsorok kialakítására a különböző kutatóintézetek és tanácsadó cégek több tucat paramétert használnak fel, amiből az ún. „versenyképességi index”-eket (competition index) alakítják ki. A World Economic Forum versenyképességi indexéhez 155 mutatót, az



International Institute for Management Development pedig 224 mutatót használ.

A kelet-európai országokkal szemben szabott versenyképességi követelményekkel kapcsolatosan jogos az az érv, hogy azok túlzóak. Nemcsak arról van szó, hogy korábban formálisan ilyeneket a belépőkkel szemben nem támasztottak, hanem a tagországok többsége sem felel meg ezeknek a követelményeknek.

A belső kereskedelemben nagyrészt csak Németország képes hosszú távú aktívumra, míg az országok többsége tartós és jelentős hiánya miatt az Unió piacán egyszerűen „nem versenyképes”. Az EU még inkább lemarad a globális versenyképességi rangsorok vonatkozásában. A World Economic Forum 1996-os Global Competitiveness Reportja az EU-tagországok közül csak Luxemburgot sorolja a 10 legversenyképesebb ország csoportjába. Egyes EU-országok lemaradását és visszacsúszását a jelentés a magas bérekben és adókban, a munkaerőpiacok rugalmatlanságában és a „költséges szociális jóléti rendszerekben” jelöli meg.

A versenyképesség és a komparatív előnyök realizálása szempontjából döntő szerepet játszik a *termelékenység* és annak alakulása, valamint a *termelési tényezők költség szintje*.

A becslések szerint Magyarország általános termelékenységi szintje 1/3–1/4-e a fejlett nyugat-európai országok színvonalának. A komparatív költségek szempontjából ugyan a relatív termelékenység számít, nyitott gazdaságban ez mégis jelentős hátrány. Kedvező viszont, hogy a magyar ipar termelékenysége az elmúlt években viszonylag gyorsan nőtt, s 1996-ban mintegy 45%-kal magasabb, mint 1989-ben vagy a visszaesés után, 1992–93-ban volt. Ez gyors felzárkózást jelez, különösen, ha sikerülne hosszabb távon fenntartani az elmúlt évek növekedését.

A magyar versenyképesség szempontjából kedvező a *munkaerőnk viszonylag jó minősége és alacsony költsége*.

A munkaerőnk jó minősége persze relatív. Kétségtelen, hogy viszonylag jó az általános műveltségi és képzettségi színvonal, bár egyre inkább csak a hasonló fejlettségű régiókkal szemben. Ha a képzés konkrét piaci igényekhez való igazodását vesszük, a kép lényegesen rosszabb, bár a magyar munkaerő megfelelően átképezhetőnek tűnik. Viszonylag megfelelő a munkaerőnk fegyelme, mentalitása és szervezhetősége.

Formálisan jelentős komparatív előnyök forrása a *magyar munkaerő alulárazottsága*. Ha a relatív termelékenységi színvonalakból indulunk ki, s azt vesszük, hogy a magyar bérek 1/7-ét, 1/10-ét teszik ki a nyugat-európai színvonalnak, akkor ez az alulárazottság jelentős mértékű.



Az alacsony bérek árnyoldalairól sem szabad elfeledkezni. Az olcsó munkaerő nem ösztönöz kellően a takarékosagra és a fejlesztésre, vagy ha úgy tetszik, a modernizációra. Az alacsony jövedelmek másrészt alulfogyasztással járnak, ami szintén korlátozza a fejlesztésnek.

Más termelési tényezőkben többnyire nincsen versenyelőnyünk, inkább hátrányunkról kell beszélni. Nincsen hazai olcsó nyersanyag- vagy energiaforrásunk, amire országunk versenyképességét építhetnénk. A magas infláció, az eladósodottság, a tőkepiacok fejletlensége és a különféle belső bizonytalanságok (konjunkturális vagy jogi) miatt magas a tőke nominális ára. A versenyképesség és a komparatív előnyök realizálása szempontjából akadályozó tényező a szegényes és fejletlen infrastruktúra, különösen bizonyos régiókban. Az egyik terület, ahol Magyarországnak számottevő természetes komparatív előnyei vannak, az a *mezőgazdaság*.

Magyarország versenyképességét a *gazdaság sajátos duális jellege* alapján lehet megítélni. A gazdaságban részben jelentős az a hazai szektor, amelyet az újonnan privatizált kis és közepes cégek képviselnek. Ezek konszolidációja folyamatban van, várhatóan magas marad a ki- és a belépés rátája, hosszabb idő alatt alakul ki termelési bázisuk és struktúrájuk, labilis marad a pénzügyi helyzetük, és új piacokon kell a lábukat megvetni. Ez a szektor a születő iparágak szimptomáival küzd, s aránya az átalakulás miatt nagyobb, mint normális körülmények között a hasonló fejlettségű országokban (pl. Görögország vagy Portugália). Nem alap nélküli az az aggodalom, hogy ezek a vállalatok a gyorsan megnyíló integrált piacokon képesek-e a „verseny nyomásának” ellenállni. A „születő iparágak” problémáját az Európai Megállapodások is elismerték, és védelmükre bizonyos lehetőséget nyújtanak. Ezt eddig igazán nem tudtuk kihasználni.

Másrészt a magyar gazdaságban, nagyrészt a külföldi tőkebefektetésekhez kapcsolódóan, kialakult egy viszonylag jelentős transznacionális vállalati szektor. A külföldi tőketulajdonú vállalatok a tőkeállomány közel 1/3-át, míg az ipari exportnak mintegy 70%-át szolgáltatják. Ez arra mutat, hogy ez a szektor nemcsak relatíve versenyképesebb, hanem a külső piaci versenyben is megállja a helyét. Amennyiben ez a szektor képes – és képes – magas termelékenységű termelő kapacitásokat létrehozni, az olcsó munkaerő mellett jelentős komparatív előnyhöz juthat.

A gazdaság két szektora között ugyan ma sincsen merev határvonal, mégis fontos lenne a kölcsönös érdekelttség alapján történő integrációjuk. Ehhez vonzóvá kell tenni az országot a *közvetlen, fejlesztést szolgáló befektetések* szempontjából.

Arra lenne szükség, hogy a külföldi befektető ne csak azzal a céllal forgassa be tőkéjét a magyar gazdaságba, hogy azután rövid időn belül annak többszörö-



sét vigye ki az országból. Mivel ez a szektor komparatív előnye alapján magas jövedelmezőségi rátákat képes realizálni, ez a jövedelem-kiáramlás jelentős összegeket tehet ki.

A külföldi beruházó ne csak piacot vásároljon, hanem tekintse az országot termelő bázisának! Egyik negatív következménye az elmúlt évek fejlődésének, hogy a bejövő transznacionális vállalatok többsége a korábbi hazai háttérpári és bedolgozó vertikumokat leépítette és saját szállítóival helyettesítette. Több területen a magyar hozzáadott érték az egyszerű összeszerelésből vagy az olcsó bémunkából származik.

Fontos, hogy külföldi befektető ne csak az alacsony bérekre építsen, és visszafejlessze a K+F kapacitásokat, hanem vonja be az országot az innovációs és kutatási folyamatba. Ehhez nyilván *átfogó modernizációs és külgazdasági stratégiára és politikára* van szükség.

A „verseny nyomásának való megfelelés”, ahogy ezt Koppenhágában megfogalmazták, azt az aggodalmat fejezte ki, hogy meg tudunk-e felelni az Unió kemény versenykövetelményeinek. Újabban éppen a fentiek miatt gyakran hangot kap egy másik aggodalom is. Vajon az Unió és különösen a fejletlenebb országai és azok iparágai mennyiben képesek kiállni a közép- és kelet-európai országok versenyének a nyomását? Nem kizárt, hogy a csatlakozási tárgyalásokon az ez utóbbi aggodalom sokkal nagyobb hangsúllyal merül már fel, mint a mi gazdaságunk „félése”.

A keleti kibővülés kihívást jelent az egész európai gazdaság számára, és széles körű strukturális alkalmazkodást és átalakulást indíthat el a kontinens mindkét felében. A strukturális átrendeződés növelheti az egész európai gazdaság erejét és versenyképességét, s javíthatja pozícióit a globális versenyben. A „keleti” kibővülés *legfőbb hozadékát* mindkét oldalnak valahol ebben az összefüggésben kell keresni.

#### 4. A gazdaság stabilizációja

A csatlakozási kritériumok között konkrét makroteljesítmény-mutatók nem szerepelnek. Az új tagoknak a belépéskor nem kell a maastrichti konvergencia-kritériumokat teljesíteni. A *stabilizáció bizonyos mértékét* mégis elvárják tőlük. Bizonyos „gazdasági egészségi tesztnek” (Peter Ludlow) meg kell felelni.<sup>3</sup> Erre utal a Tanács tavalyi madridi ülésének a közleménye is, miszerint „ezeknek az országoknak a fokozatos és harmonikus integrációja” egyebek

3 Peter Ludlow: Preparing for Membership. CEPS 2nd International Advisory Council Report. 1996.

mellett a „stabil gazdasági és monetáris környezet megteremtése” mellett való-  
sulhat meg.<sup>4</sup>

Magyarország makrogazdasági teljesítménye jelenleg nem felel meg ezek-  
nek az elvárásoknak. Különösen nem a növekedés és az infláció tekintetében.  
Véleményem szerint az EU-átlagot minimálisan meghaladó gazdasági növe-  
kedést (3–3,5%-os), és az infláció 10–12% körüli szintjét mindenképpen elvár-  
ják tőlünk. A csatlakozásra felkészülő gazdaságpolitika a makrogazdasági telje-  
sítmény bizonyos „sarokszámait” tehát nem hagyhatja figyelmen kívül, ami a  
jelenlegihez képest egy új és hosszabb távon „fenntartható” fejlődési pályára  
állást feltételezne.

Az integráció-érettségünk paramétereinek elemzése alapján *összefoglalóan  
megállapítható*, hogy a visegrádi országok nem kevésbé érettek az EU-tagságra,  
mint annak idején Görögország, Spanyolország és Portugália voltak. Ugyan-  
akkor az integrációs előnyök maximális kihasználása érdekében a valóságos  
piaci viszonyok és a versenyképesség átfogó fejlesztésére, a makrogazdaság  
tényleges stabilizációjára van szükség.

## Az integrációs hatások mérése

Az integrációval kapcsolatos folyamat mérésének nagy irodalma van, s jelentős  
módszertani eszköztár áll a rendelkezésünkre. Nem kell tehát új dolgokat kita-  
lálnunk.

A kereskedelmi előnyök és hátrányok elemzésére mindenekelőtt a nemzet-  
közi munkamegosztás elméletei s különösen a vámunió-elméletek állnak ren-  
delkezésre. A kereskedelemteremtésre és eltérítésre vonatkozó elemzéseknek  
előnye, hogy jól kidolgozott módszerek alapján a hatékonysági és jóléti elő-  
nyök és hátrányok jól kvantifikálhatók, s legalábbis az általuk feltételezett  
tényezők alapján viszonylag pontosan megvonható a vámuniós integráció  
mérlege.

Az EK-ban egyik legátfogóbb hatáselemzést az egységes európai piaccal  
kapcsolatosan végezték, amit az ún. Cecchini-jelentés összegezett. A jelentés  
mikro- és makroszinten vizsgálta a hatásokat, és azokat aggregálni igyekezett.  
Az impresszív elemzéseknek minden várakozást felülmúló hatása volt. Nagy  
szerepe volt abban, hogy az 1980-as évek elején eluralkodó „europesszimiz-  
must” „europhoria” váltotta fel, s az egységes piac programja általános társadal-  
mi és politikai támogatást kapott.

<sup>4</sup> Conclusions if the Presidency, Madrid 15/16 December 1995. SN 400/95 and Agence Europe, No. 6629, 17 december 1995.



Hasonlóan széles körű elemzések előzték meg az EMU és az egységes valuta bevezetésének hatásait. A Bizottság tanulmánya (*One market, one money*) ezeket próbálta sokoldalúan felmérni.

Az integrációs hatások közül előadásomban mindössze a regionális és a költségvetési hatások mérésének néhány aspektusáról kívánok szólni. Az egyéb hatások természetesen egyaránt fontosak, de elemzésükre most nem tudok kitérni.

1. Az EK-integrációban kezdettől nagy figyelmet fordítottak a *regionális egyenlenségek* kezelésére. A regionális különbségek Magyarországon is jelentősek, és ezek az átalakulás körülményei között tovább mélyültek. Ezek elemzése a költségvetési transzferek szempontjából különösen fontos, sőt Magyarország számára a nettó költségvetési transzferek egyik fő forrása az agrárpolitika mellett az Európai Regionális Fejlesztési Alap lehet.

Az integráció gazdaságtana a regionális politika mellett két irányban érvel. Egyrészt a regionális gazdasági egyenlenségek káros következményekkel járnak a nemzeti gazdaságok fejlődésére és hatékonyságára (magasabb munkanélküliség, inflációs nyomás és szuboptimális forráskihasználás stb.), következésképpen a regionális egyenlenségek csökkentése ösztönzőleg hat a gazdasági növekedésre és növeli a jólétet.

Másrészt, a regionális egyenlenségei *következhetnek magából az integrációból*, s ezért közösségi kezelést igényelnek. Tény, hogy a probléma már a vámunióval összefüggésben felmerül, de különösen határozottan kapott hangot az *egységes piac és az EMU kapcsán*. Ez utóbbi esetében az árfolyam-mechanizmus kiiktatása megszünteti azt a lehetőséget, hogy a kevésbé versenyképes szektorokat vagy régiókat leértékeléssel lehessen megvédeni. Az egységes valutával tehát a regionális egyenlenségek növekedése várható. Ezeket kohéziós (jövedelemkülönbségeket csökkentő) költségvetési transzferekkel kell ellensúlyozni. Nem véletlen tehát, hogy a közösségi regionális politika és regionális kiegyenlítő alap létrehozása már az 1970-es évek elején az első monetáris uniós tervekkel kapcsolatban felmerült, majd az 1980-as évek végétől az egységes piac és az EMU kapcsán ismét napirendre került.

A regionális egyenlenségeket kiegyenlítő támogatások tehát, amelyek várhatóan a Magyarországot kedvezményező pénzügyi transzferek jelentős részét tehetik ki, *nem egyszerűen jótékonykodási szándékokon múlnak, hanem azok kemény közgazdasági indokokon alapulnak*. Így maximálisan ki kell használnunk azokat az érveket, amelyek a regionális transzferek közgazdasági jogosságát és indokoltságát támasztják alá. S ha ezt le tudjuk fordítani konkrét és meggyőző igényekre, akkor, mint több tagország példája is mutatta, kedvezőbb pozíciókat tudunk elérni.



2. A keleti kibővítés egyik legsúlyosabb korlátja az EU részéről a *várható költségvetési terhekkel* kapcsolatos. Az elmúlt években a kibővüléssel várt *nettó költségvetési transzferekre* számos becslés (Richard Baldwin, Anderson és Tyers vagy Brenton és Gros) készült, amelyek meglehetősen nagy eltérésekkel 10 és mintegy 70 milliárd ECU közötti intervallumban helyezkedtek el.

Ezek között természetesen az EU Bizottságának számításai külön említést érdemelnek. Ezek szerint ha a 12 jelölt ország csatlakozik, akkor az mintegy 38 milliárd ECU-val növelné meg a Közösség költségvetését. Nem kívánom ismertetni a várható költségvetési transzferekről az elmúlt években készült számos kalkulációt. Ezek közötti nagy eltérések túlnyomórészt a kibővülések ütemezéséből (mikor és hányan csatlakoznak), a jelenlegi vagy a várható jogosultságok megbecsüléséből, valamint a várható reformok bizonytalanságából adódtak.

Magyarország csatlakozásának esetére szintén számos becslés készült. Mustó István professzor, parlamenti képviselő saját számításai szerint 1994-ben Magyarország 4 milliárd ECU-t kapott volna az EU-költségvetésből, míg a befizetései 400–500 millió ECU-t tettek volna ki. A 3,5 milliárd ECU-s nettó transzfer a közösségi költségvetés 5%-át képviselte volna.<sup>5</sup> 1992-ben az EU két legszegényebb tagországa, Görögország és Portugália, a strukturális alapokból egy főre évi 200 ECU-t kapott, ami várhatóan 1999-ig 400 ECU-re emelkedik majd. Bryan Ardy szerint, ha a csatlakozó közép-európai országok 1999-es alapon az egy főre eső 200 ECU-t megkapnák, ez az EU költségvetési kiadásait 13 milliárd ECU-val (15%-kal) növelné. Ez a befizetési plafonnak a GDP 1,27%-ról 1,47%-ára való emelésével finanszírozható lenne.<sup>6</sup> Kádár Béla szerint az EU támogatási elveinek változatlansága és a magyar GDP 1989-es szintjének 5 éven belüli elérése esetén a magyar teljes jogú tagság mintegy évi 2 milliárd dolláros költséget jelentene a Közösség számára.<sup>7</sup> Mindezek közel állnak az általunk 1994-ben végzett számításokhoz, miszerint Magyarország tagsága esetén reálisan 1,5–2 milliárd ECU nettó költségvetési átutalásra számíthat.

A kibővülés költségvetési konzekvenciái nem véletlenül képezik az új tagok felvételének egyik legkomolyabb korlátját. Az EU-országok részéről ilyen szempontból számos tényező és megfontolás szól a kibővülés ellen.

1. Nyugat-Európában *hiányoznak azok a többletek*, amelyek a közép-kelet-európai országok támogatásához szükségesek lennének. Amikor a második világháború után az Egyesült Államok a Marshall-tervet meghirdette, akkor ehhez mind a pénzügyi (fizetésimérleg-többlet és aranytartalékok), mind a

<sup>5</sup> *Világgazdaság*, 1995. október 9.

<sup>6</sup> Bryan Ardy: *Central European Enlargement*.

<sup>7</sup> Kádár Béla: Cui prodest Európai Unió? *Magyar Tudomány*, 1996. 2. 163.



fizikai többletek (élelmiszerek és beruházási javak) a rendelkezésre álltak. Ugyanakkor az 1970-es évek elejétől az EK-országok növekvő költségvetési hiánnyal kerültek szembe. 1973 előtt az EK-országok átlagában a költségvetési deficitek alatta maradtak a GDP 1%-ának. Az olajárrobbanások és a recesszió következtében ezek a hiányok mintegy 5,5%-ra ugrottak, s az 1990-es években sem sikerült azokat a 3,5%-os szint alá szorítani. A kelet-európai forradalmi változások után többlettekkel csak Németország rendelkezett (fizetési mérleg), de azokat az egyesülés költségei teljes mértékben felszívták.

2. Az EU-országok részéről *hiányzik a stratégiai érdekelttség* a közép-kelet-európai országok támogatásában. Ugyan az utóbbi évekre elfogadták a kibővítés tényét, de sem a főbb politikai erők, sem a közvélemény nem kész nagyobb pénzügyi áldozatok vállalására.

3. Az EMU keretében az egységes valuta szilárdsága érdekében az EU *szigorú monetáris és költségvetési korlátokat szabott magának* (maastrichti kritériumok). Ezeket a tagországok szinte kivétel nélkül csak szigorú takarékosági intézkedések és költségvetési megszorítások mellett képesek teljesíteni. Az EMU-ban való részvétel érdekében több ország is széles körű társadalmi és szociális konfliktusok vállalására kényszerült, amit a munkanélküliség magas szintje is súlyosbít.

Hasonlóan korlátozottak a finanszírozási képességek az Unió költségvetésének szintjén. Ilyen körülmények között az Unió *segélyezési kapacitásai* mind pénzügyi, mind politikai értelemben jelentősen *korlátozódtak*.

4. Az utóbbi időszakban több vonatkozásban kiéleződött az EU finanszírozási *forrásaiért folyó verseny*. Ennek számos viszonylati dimenziója van. Mindezekelőtt az EU fejletlenebb tagországait kell megemlíteni, de a segélyigénylők sorában ott vannak a Mediterrán-medence nem tagországai vagy a többi fejlődő ország (pl. a Lomói Konvenciók országai).

5. Az ellensúlyozás egyik lehetősége a *projektverseny kihasználása*. Köztudott, hogy a források kihasználása gyakran a lehetőségek alatt van, esetenként még a fejlett országok esetében is. Ez azt jelenti, hogy egy ország, ha képes megalapozott és jól kidolgozott projektekkel előállni, az érdekeit megfelelő érvekkel alátámasztani, akkor jó az esélye arra, hogy többletforrásokhoz jusson.

A költségvetési transzferek mechanizmusai és szabályai szerint a magyar költségvetés nagyrészt felkészületlen a támogatások fogadására. Mivel az EU-költségvetés maximum 75–80%-ban járul hozzá adott programok finanszírozásához, 1,5–2 milliárdos transzferek esetén ez 350–400 millió ECU magyar hozzájárulást feltételezne. Ez mintegy 65–75 milliárd forintos többletterhet jelentene a magyar költségvetésnek, amit csak radikális reform és átstrukturálás mellett képes befogadni. Az államháztartási reform ezért fontos része a felkészülésünknek.



## Az integráltság mérése

Az integráció állapotát, az integráltság mértékét két szinten közelíthetjük meg. Részben vizsgálhatjuk az *integrációs formák* kialakítását, azok megvalósíthatósági szintjét (vámuniótól a gazdasági vagy politikai unióig), másrészt mérhetjük a *reálintegráció állapotát és mértékét*. Ez utóbira leginkább a kapcsolatintenzitási, összefonódási és a kölcsönös függési mutatókat használhatjuk.

Az elmúlt öt évben rövid idő alatt a magyar gazdaság viszonylag magas függése alakult ki az EU-piacoktól. Magyarország integrációs kereskedelme becsléseink szerint 1995-re megközelítette a GDP-nk 18–20%-át, s importjának és exportjának 1994-ben mintegy 45–51%-a (majd a kibővülés után 1995-ben mintegy 62–63%-a) bonyolódott az EU országaiéval. Ez magas beépülési arány az integrációba, hiszen az EU internkereskedelmének arányai 1994-ben 57–58% körül voltak. Ugyanakkor függésünk egyoldalú, s *nem képvisel kiegyensúlyozott integrációs kapcsolatokat*.

Az integráltság szintjét jól jellemzik az intraszektorális áramlások (ágazaton belüli specializáció) mérőszámai. Bizonyos ágazatokban (pl. textilipar) ezek kedvező képet és dinamikát mutatnak, de nagyban bér munkán alapulnak. A termékekben kicsi a magyar hozzáadott érték, s hiányzik a magas technológia- és intelligenciataralmak kölcsönös cseréje. Olyan országokban, mint Svédország vagy Finnország, már a csatlakozás előtt jelentős nemzeti bázisú transznacionális vállalati szektor alakult ki. Ez Magyarországon vagy a többi közép-kelet-európai csatlakozó országban hiányzik.

## A mérés hasznossága

Az integráció előny-hátrány mérlegéhez a közvélemény, a média és a politikusok egyaránt nagy várakozásokat fűznek. Ezért rendkívül fontos, hogy az ilyen elemzések értelmét és funkcióit pontosan meghatározzuk, és eleve elejét vegyük a félreértéseknek.

Nyilvánvaló, hogy az előzőekben vázolt körülmények miatt nemcsak az lehetetlen, hogy valamiféle összevont előny-hátrány mérleg számszerűsítésére vállalkozunk, hanem – tekintettel a számos biznytalansági tényezőre – nagy nehézségekbe ütközik egy adott pillanatban valamilyen egyenlegnek még nagyjából megközelítő megvonása is. Ilyet természetesen meg lehet kísérelni, csak éppen annak komolysága kérdőjelezhető meg. Kísérletet lehet tenni az előny-hátrány mérleg egy szegmensének a kiszámítására, mint ahogy ez gyakran a költségvetési transzferek vonatkozásában történik, de tudatában kell lenni, hogy az ilyen számítások a teljes képnek csak egy töredékét tükrözik.



Ennek ellenére alapvető érdekünk, hogy európai integrációnk előnyeit és hátrányait minél teljesebben, sokoldalúbban és részletesebben azonosítsuk. Az ilyen elemzések korántsem hiábavalóak. A mérlegek készítése a politikát számos vonatkozásban orientálhatja, adott részterületen segítheti az érdekeink azonosítását, az álláspontok, a tárgyalási stratégiák vagy a szükséges politikák kidolgozását. A különböző területeken az előnyök és hátrányok megközelítően pontos felmérése szükséges ahhoz, hogy a politikus vagy az egyén az integrációnk adott kérdésében értelmes és demokratikus döntést hozhasson.

Miközben a részkérdéseknek eldöntésében az előnyök és hátrányok pontos felmérése rendkívül fontos, a stratégiai döntésekben valamennyi megfontolás komplex mérlegelésére van szükség. Richard Portest idézem: „Hangsúlyozni szeretném először is, hogy a kibővülés gazdasági költség-haszon elemzése másodlagos jelentőségű, minthogy a kibővülés fő érve politikai, és nem gazdasági. A közgazdászoknak persze el kell játszaniuk a szerepüket.”<sup>8</sup>

Ha stratégiai alapon úgy érezzük, hogy az euro-atlanti integrációhoz való csatlakozásunk hosszú távú nemzeti érdekünk, akkor a részterületek előny-hátrány mérlegének túldimenzionálása súlyos veszélyekkel járhat. Magyarország hosszú távú biztonsága és európai integrációja nyilván nem rendelhető alá annak, hogy a csatlakozás például a tejtermékek árainak további emelkedésével vagy akár valamilyen kór miatt a szarvasmarha-állomány kivágásával járhat együtt. (Az utóbbival kapcsolatban megjegyzendő, hogy adott esetben azt tagság nélkül is meg kellene tenni, s még kompenzációra sem számíthatnánk.) Ahogy nem kívánatos a költségek egyoldalú prezentálása, úgy az is veszélyes, ha az integráció előnyösségéről túlzottan rózsaszín képet festenénk.

Az integrációt, mint stratégiai érdeket nem lenne szerencsés napi politikai vitáknak vagy akár adott év választási kampányérdekeinek alárendelni. Az integrációs hatások mérése eredményeinek politikai, főként napi politikai felhasználásával kapcsolatosan nagy óvatosságra és felelős megközelítésre van szükség. A politikusnak, a médiának s nem utolsósorban a tudósnek ezért különösen *nagy a politikai felelőssége*.

---

8 R. Portes: *The European Economy at the End of the Century. A More Integrated Europe. Preliminary Draft.* September 1996. 6.





Vékás Lajos  
az MTA rendes tagja

# A SZERZŐDÉSI SZABADSÁG ALKOTMÁNYOS KORLÁTAI

Elhangzott 1997. szeptember 24-én

## I.

Az 1850 nyarán közzétett, akkor s azóta is sok vitát kiváltott, *Forradalom után* című röpiratában Kemény Zsigmond a következő megállapítást teszi: „A legnagyobb közjogi változások, a legáltalánosabb forradalmak az osztály és szukcesszió kérdéséből támadnak. Hosszabb időt véve mértékül, a magánjog rendezése határozza el, hogy egy állam minő alkotmánnyal bírjon, s hogy az arisztokrácia, demokrácia vagy a szocializmus és a mindent fölösztató elméletek vegyék át a közügyek vezénélését.”<sup>1</sup>

1. A magyar történelem tragikus fordulatai folytán a Kemény által másfél évszázada tárgyalt társadalmi kérdések – igaz, alaposan megváltozott feltételek között – napjainkban újra napirendre kerültek. A társadalmi alapkérdéseknek ez a fatális ismétlődése önmagában is mutatja: hová vetette vissza

---

<sup>1</sup> Kemény Zsigmond: *Forradalom után*. In: Kemény: *Változatok a történelemre*. Szépirodalmi Könyvkiadó, Bp. 1982., 228. sk.

körülményeinket a termelő javak szinte teljes államosítása. Mindenekelőtt ismét eldöntésre várt a kérdés: milyen tulajdoni berendezkedésen alapuljon az új társadalom alkotmányos rendje. S máig megoldásra vár az a probléma, hogy milyen alkotmányos garanciák, illetve korlátok övezzék a magántulajdonosi rendet.

Témánk, a szerződési szabadság alkotmányos korlátai az utóbbi problémakör részének tekinthető. A magántulajdonosi rend egyik legfőbb velejárója (mondhatni: attribútuma) a szerződési szabadság, a vagyoni forgalom magánautonómiája. Évszázados ugyanakkor az a vita, hogy – a társadalmi egyensúly fenntartása érdekében – mennyiben és hogyan kell korlátok közé helyezni a magánautonómia szféráját.

Tárgyunknak mélyre nyúló és szerteágazó gazdaság- és társadalomfilozófiai, illetve gazdaság- és társadalompolitikai háttere van. Ennek elemzése már csak azért is csábító volna, mivel Kemény Zsigmond *Jeromy Bentham*ra hivatkozik. Róla pedig tudjuk, hogy minden állami beavatkozásnak és gondoskodásnak heves ellenzője, a szélsőségesen individualista „laissez faire et laissez passer” elv megfogalmazója és egyik fő képviselője volt. Ezeknek a kérdéseknek a taglalásától terjedelmi okokból mégis el kell tekintenünk. Mondanivalónkat így a szorosan vett jogi, közelebbről az alkotmányjogi és a magánjogi problematika elemzésére korlátozzuk.

2. Részletesebb történeti elemzés nélkül is megállapíthatjuk, hogy – liberális gazdaságfilozófiai elméletek jelenléte és liberális gazdaságpolitikai törekvések vissza-visszatérő érvényesülése ellenére – az elmúlt száz év a magántulajdonra épülő piacgazdaságokban a szerződési szabadság korlátozását hozta magával. Kevesen vitatják, hogy akár a nemzetgazdasági folyamatok egyensúlyának biztosítása, akár más össztársadalmi (pl. környezetvédelmi) igények, akár szociális szempontok (pl. az ún. „gyengébb fél” védelmének követelményei) a szerződési szabadság korlátozását tehetik szükségessé. Kartelljogi, versenyjogi korlátok mellett – már régóta – a szorosan vett magánjogi szabályozás sem maradhat mentes a szerződési szabadságot korlátozó tilalomfaktól. Ezt tükrözik a magánjogi (polgári jogi) törvénykönyvek is, amelyek – a múlt század vége óta szaporodó – kógens normákkal keretezik a szerződési szabadság elvét kifejező, alapvetően diszpozitív szabályozást.<sup>2</sup>

Az igazán új keletű, 20. századi kérdés: vannak-e, s ha igen, hol húzódnak a magántulajdonosok jogügyleteinek, a szerződési szabadságnak alkotmányos

2 A német BGB alkotói annyira evidensnek tekintették a szerződési szabadság érvényesülését, hogy az elvet magát nem is vették fel a Kódexbe. A későbbi törvénykönyvekbe már bekerült a szerződő felek autonómiája: svájci ZGB Art. 19., Codice civile Art. 1322., magyar Ptk. 201.§ (1) bek. stb.



határai. Manifesztum-jellege miatt is elsősorban *Ludwig Raiser* nagyszabású tanulmányára kell itt hivatkoznunk; nem feledve, hogy a szociális érzékenység magánjogbeli igénye és követelése legalább Anton Mengerig és Gierkéig vezethető vissza.<sup>3</sup> Raiser nézeteinek azóta számos színvonalas követője támadt.<sup>4</sup> Igaz, az ellentétes oldal: a magánautonómia (és ezzel a piacgazdaság) hívei, mint *Medicus* vagy *Hommelhoff*, sem hallgatnak, s érveik nem kevésbé alaposak, kritikusak és meggyőzőek.<sup>5</sup>

3. Ma már, némi történelmi távlatból szemlélve, megállapíthatjuk, hogy a magánjog évszázados mozdulatlansága e tekintetben is a múlté. Boehmer 1950-ben még többé-kevésbé joggal faraghatta a sokak által sokszor idézett aforizmát: „A közjog elmúlik, a magánjog megmarad.”<sup>6</sup> Azóta – különösen magánautonómia és alkotmányos alapjogok viszonyában – lényeges változások mentek végbe; bár ez a folyamat korántsem tekinthető egyirányúnak, s még kevésbé lezártnak.

Az Amerikai Egyesült Államok bíróságai e tekintetben nagyon visszafogott gyakorlatot folytatnak. Ítéleteik csak esetlegesen foglalkoznak azzal a kérdéssel, hogy bizonyos alapvető alkotmányos jogok megsérthetők-e a magánautonómia körében, azaz alkotmányos alapjogok félretehető-e magánjogi szerződéssel.<sup>7</sup> Az utóbbi évtized gyakorlatából az ún. béranyasággal kapcsolatos ítéleteket hozhatjuk fel erre példaként.<sup>8</sup> Jellemző a bíróságok hozzáállására *Farnsworth* konklúziója, amely az esetek rövid bemutatását azzal a megállapítással zárja, hogy a tárgyalat ítéletek egyike sem kötelezi el magát: sem azt nem mondják, hogy a béranyaszerződés sérti az alkotmányt, sem azt, hogy az ilyen szerződés alkotmányos védelemben részesül. Az USA Legfelsőbb Bírósága pedig nem foglal állást ebben a tárgyban. Így az egyes tagállamok törvényhozása szabadon dönthet arról, hogy tiltja-e vagy védi-e a béranyaszerződéseket.<sup>9</sup>

3 Raiser: *Grundgesetz und Privatrechtsordnung*. 46. DJT, Bd.II., Teil B, 2. skk., München, 1967; Menger: *Das bürgerliche Recht und die besitzlosen Volksklassen*. Tübingen, 1890; von Gierke: *Die soziale Aufgabe des Privatrechts*. Berlin, 1899.

4 Kübler: *Privatrecht und Demokratie – zur Aktualität gesellschaftstheoretischer Vorstellungen in der Jurisprudenz*. In: *Funktionswandel der Privatrechtsinstitutionen*. Festschrift Raiser. Tübingen, 1974, 697. skk. Wiethölter: *Rechtswissenschaft*. Frankfurt/M., 1968. 165. skk.; Roscher: *Vertragsfreiheit als Verfassungsproblem*. Berlin, 1974, 70. skk., Hesse: *Verfassungsrecht und Privatrecht*. Heidelberg, 1988 stb. és különösen Höfling: *Vertragsfreiheit*. Heidelberg, 1991.

5 Medicus: *Der Grundsatz der Verhältnismässigkeit im Privatrecht*. *AcP*, 192 (1992) 35–70.; Hommelhoff: *Zivilrecht unter dem Einfluss europäischer Rechtsangleichung*. *AcP*, 192 (1992) 71–107.

6 Boehmer: *Grundlagen der bürgerlichen Rechtsordnung*. 1. Buch. Tübingen, 1950. IX.

7 Farnsworth: *Freedom of Contract and Constitutional Law* (United States Report). In: Rabello/Sarcevic (ed.): *Freedom of Contract and Constitutional Law*. Jerusalem, 1998. (261–275.) 266. skk.

8 Baby M case: 537 A. 2d 1227, 1249 (N. J. 1988); Johnson v. Calvert case: 851 P. 2d 776 (Cal. 1993); vö. Farnsworth: i. m. 267. skk.

9 Farnsworth: i. m. 267. sk.



Az igazsághoz hozzátartozik, hogy ugyanez a tartózkodás jellemzi az Egyesült Államok Legfelsőbb Bíróságát a szerződési szabadság védelme tekintetében is. Elvben ugyan az Alkotmány több rendelkezése is eszközül szolgálhat a szerződési szabadság védelmére, ha azt tagállami vagy szövetségi norma megsérténé.<sup>10</sup> A tagállamok szerződési szabadságot sértő törvényhozási aktusaival szemben kifejezett védelmet kínál az ún. „contract clause” [Article I. § (1787)]: „No State shall ... pass any ... law impairing the Obligation of Contracts ...” Erre az alkotmányos rendelkezésre támaszkodva a Legfelsőbb Bíróság a 19. század során számtalan alkalommal állta útját a szerződési szabadságot sértő tagállami törvényhozási kísérleteknek.<sup>11</sup> A nagy gazdasági világválság körülményei azonban más irányba térítették el az ítélkezési gyakorlatot.<sup>12</sup> S noha 1977 óta a „contract clause” alkalmazása ismét bizonyos tért nyert,<sup>13</sup> a múlt századi „virágkor” nem tért vissza.<sup>14</sup> Hasonló tendencia figyelhető meg más alkotmányos rendelkezéseknek, pl. az ún. „due process clause”-nak [Amendment XIV, (1868)] a szerződési szabadság védelmére történő alkalmazása terén is. Előbb a szerződési szabadság elve kapott nagyobb hangsúlyt,<sup>15</sup> de a világválság idején e körben is gyökeres fordulatra került sor.<sup>16</sup>

Egyes nyugat-európai alkotmánybíróságok ugyanakkor a változások élére álltak, és alkotmányos alapjog-követelményeket érvényesítenek a magánjog, ezen belül a szerződések világában. Ahol pedig hatásköri szabályaik lehetőséget adnak erre, a sokkal inkább fontolva haladó polgári bíróságok ítélkezési gyakorlatát is átformálják. Illusztrációként a német Szövetségi Alkotmánybíróság három, az elmúlt évtizedben született, nagy vihart kavarázó ítéletére hivatkozunk: a kiskorú személy képviselője által történő adósságba verése tárgyában hozott, a kereskedelmi képviselő ügyletkötési kompetenciáját alkotmányosan körülhatároló, továbbá a vagyontalan hozzátartozó kezességvállalásának érvényessége kérdésében kimondott döntésre.<sup>17</sup> Az ezekben a határozatokban kifejezett üzenet egyértelmű: a magánjog normáit és azok alkalmazási gyakorlatát az alkotmányos alapjogok mérlegére kell tenni és korlátai közé kell

10 Farnsworth: uo.

11 L. mindenekelött: Dartmouth College case: 17 U. S. (4 Wheat) 518 (1819).

12 Home Building & Loan Association v. Blaisdell case: 290 U.S. 298 (1934).

13 United States Trust Co. v. New Jersey case: 431 U. S. 1 (1977); Allied Structural Steel Co. v. Spannaus case: 438 U. S. 234 (1978).

14 Farnsworth: i. m. 265.

15 Lochner v. New York case: 198 U. S. 45 (1905).

16 Nebbia v. New York case: 291 U. S. 502 (1934).

17 BVerfGE 72, 155; BVerfGE 81, 242; BVerfGE 89, 214. Az utóbbi német alkotmánybírósági ítéletet és a hozzá kapcsolódó jogirodalmi vitát behatóan elemzi Salgo: Rechtliche Grenzen der Überschuldung bei jungen Erwachsenen. *Justiz*, Nr. 37. – März 1994, 212–217.



helyezni.<sup>18</sup> A német Szövetségi Alkotmánybíróság álláspontja talán a magánjog fejlődésének egy újabb irányát jelzi. Ennek lényege három tételben foglalható össze:

- az alkotmányos alapjogok a magánautonómia világát is korlátok közé szorítják;
- a korlátok nem közvetlenül érvényesülnek, hanem azokat a magánjogi normák tilalomfáinak kell közvetíteniük; és
- e korlátoknak a polgári bíróságok ítélezési gyakorlatában kell garantáltan megjelenniük.

Ezeknek a téziseknek az elemzésére a IV. pontban még részletesen kitérünk.

4. A magántulajdoni rendre történő átállás időszakában Kelet-Európában, így Magyarországon is, előbb a szerződési szabadság alkotmányos garanciáinak megerősítése került napirendre. Ez a történeti előzmények ismeretében tökéletesen érthető.

Nálunk a szerződési szabadság kiteljesedésének útjában álló jogszabályok száma – az ilyen irányú alkotmánybíróági panaszokból ítélve – 1990-re már meglehetősen lepadt, ami a gazdasági átalakulás viszonylagos folyamatosságát és a dereguláció eredményességét mutatja. Ismételten alkotmánybíróági eljárás tárgya volt a Polgári Törvénykönyvnek az a rendelkezése, amely szerint jogszabály meghatározhatja a szerződés egyes tartalmi elemeit, és kimondhatja, hogy ezek a szerződésnek akkor is részei, ha a felek eltérően rendelkeznek [Ptk. 226.§ (1) bek.]. Még inkább támadták annak a törvényi lehetőségnek az alkotmányosságát, amely szerint jogszabály – kivételesen – a hatályba lépése előtt megkötött szerződések tartalmát is megváltoztathatja [Ptk. 226. § (2) bek.]. Ezeken túl a kamatos kamat kikötését tiltó szabály [Ptk. 232.§ (1) bek.] alkotmánybíróági megsemmisítése, a kötött helyiséggazdálkodás jogi előírásainak a szerződési szabadságot indokolatlanul korlátozó voltát megállapító döntés, illetve a szerződéskötési kötelezettség elvi lehetőségét biztosító norma [Ptk. 198.§ (2) bek.] és a kötelező felelősségbiztosítás eltérő szabályozására vonatkozó törvényi felhatalmazás alkotmányosságának megállapítása [Ptk 567.§ (3) bek.] érdemel említést.

A társadalmi fejlődésben más szintet képviselő fejlett piacgazdaságok új típusú korlátai, elsősorban a szociális szempontok érvényesítését szolgáló megszorítások problémái eddig nálunk még nem jelentkeztek. Bizonyosra vehetjük ugyanakkor, hogy belátható időn belül ezek a kérdések is felmerülnek, éspedig mind a belső viszonyok kényszerítő ereje, mind pedig – különö-

18 Reuter: *Elterliche Sorge und Verfassungsrecht*, *AcP*, 1992 (1992) [108–152.], 149.; Roscher: i. m. 70. skk.

sen – az Európai Unióhoz történő csatlakozás folyamatában megvalósítandó jogharmonizáció részeként. Ezért mindkét témakört érinteni kívánjuk:

– először a szerződési szabadság korábbi, az úgynevezett szocialista tervgazdálkodás korszakából még visszamaradt korlátainak lebontásával és egyidejűleg a magánautonómia alkotmányos garanciáinak kiépítésével foglalkozunk; ezt követően

– az új típusú – szociális fogantatású – alkotmányos korlátok elvi és jogdogmatikai problémáit tárgyaljuk.

## II.

1. Ami az alkotmányos garanciák kiépítését illeti, a magyar Alkotmánybíróság már 1990–91-ben fontos tételeket szögezett le. Abból kiindulva, hogy az Alkotmány [Alk. 9.§ (1) bek.] Magyarország gazdaságát piacgazdaságként tételezi, megállapította, hogy „a piacgazdaság lényeges eleme a szerződési szabadság”, azt az Alkotmánybíróság „önálló alkotmányos jognak tekinti”,<sup>19</sup> s hogy „a szerződéses viszonyokban a jogállamiság a szerződési szabadságot jelenti”.<sup>20</sup>

Későbbi határozatokban ez az álláspont dogmatikailag árnyaltabb alátámasztást kapott. Így a szerződési szabadság alkotmányos háttereként konkrétabb hivatkozási alappá vált a vállalkozás és a gazdasági verseny szabadsága [Alk. 9.§ (2) bek.].<sup>21</sup> Az Alkotmánybíróság egyidejűleg úgy foglalt állást, „hogy a szerződési szabadság nem tekinthető alkotmányos alapjognak; következésképpen az alkotmányos alapjogi értékrendben helyet foglaló jogosultságokra vonatkozó sérthetetlenségi, érinthetetlenségi alkotmányos tétel sem irányadó rá”, s ezért „alkotmányosan még lényegi tartalmát illetően is korlátozható, amennyiben a korlátozás végső eszközének fennállnak alkotmányos indokai”.<sup>22</sup>

Az alapvető pillérek így hamar készen álltak: az alkotmányos garantáltság és a korlátok elvi lehetőségének alkotmányossága egyaránt megjelent.

19 13/1990. (VI. 18.) AB hat.; hasonlóképpen 4/1991. (II. 16.) AB hat.; 32/1991. (VI. 6.) AB hat.; 15/1994. (III. 10.) AB hat.; 25/1994. (V. 10.) AB hat.; 39/1994. (VI. 30.) AB hat.; 16/1995. (III. 13.) AB hat.; 66/1995. (XI. 24.) AB hat.; 74/1995. (XII. 15.) AB hat.; 42/1996. (X. 9.) AB hat.

20 64/B/1990. AB hat.

21 43/1991. (VII. 12.) AB hat.; 29/1993. (V. 6.) AB hat.; 61/1993. (XI. 29.) AB hat.; továbbá több későbbi határozat.

22 61/1993. (XI. 29.) AB hat.; tartalmilag ugyanígy már a 32/1991. (VI. 6.) AB hat. és több későbbi határozat is: 15/1994. (III. 10.) AB hat.; 66/1995. (XI. 24.) AB hat. stb. Nem alkotmányos alapjog a szerződési szabadság a német Grundgesetzben sem; védelmét más alapjogokból és szabadságokból (a tulajdon garantálásának, a vállalkozás és az egyesülés szabadságának stb. elveiből) vezetik le.



2. Mivel a szerződési szabadság alapjogi védelemben nem részesül, az Alkotmánybíróság más alkotmányos elvek és tételes szabályok közvetítésével tudja ezt a követelményt védelemben részesíteni: a jogállamiság elve [Alk. 2.§ (1).], az emberi méltósághoz való jog védelme [Alk. 54.§ (1) bek.], illetve a diszkriminatív eljárás tilalma [Alk. 70/A. §] szolgálnak erre eszközként. „A nem alapjogokat érintő korlátozás akkor alkotmányellenes – szögezi le az Alkotmánybíróság –, ha az »önkényes«, azaz »indokolatlan«, vagyis nincs ésszerű oka, mert a norma ilyenkor sérti az emberi méltósághoz való jogot, hiszen ily esetben bizonyosan nem kezelték az érintetteket egyenlő méltóságú személyként, s nem értékelték mindegyikük szempontjait hasonló figyelemmel, körültekintéssel és méltányossággal.”<sup>23</sup>

A szerződési szabadság alkotmányos korlátozhatósága körében az Alkotmánybíróság a *rebus sic stantibus clausula* analógiájára határozta meg azokat a feltételeket, amelyek mellett jogszabály megváltoztathatja fennálló szerződések tartalmát. Ez gyakorlatilag azt jelenti, hogy magánjogi szerződésekbe történő utólagos normatív beavatkozásra az Alkotmánybíróság szerint sor kerülhet, éspedig akkor, ha a szerződéskötés után megváltozott körülmények miatt valamelyik szerződő fél lényeges és jogos érdeke sérelmet szenvedne, s azt nem egyedi bírói aktussal, hanem – elsősorban a hasonló szerződések tömeges előfordulására tekintettel – jogalkotási aktussal lehet és kell megszüntetni.<sup>24</sup>

### III.

1. A magánautonómia korlátozásának témakörében az elméleti kérdések tárgyalásánál először is meg kell állapítanunk, hogy bár a problémák zöme kétségtelenül a szerződés tartalmi alakításával kapcsolatban merül fel, a szerződéskötési szabadság korlátai korántsem elhanyagolható jelentőségűek. S itt most nemcsak a szerződéskötési kötelezettség előírásának mint a szerződési szabadság lényegi korlátjának – utalásszerűen már érintett – alkotmányosságára gondolunk. Legalább ilyen jelentősége van a szerződési partner megválasztásával kapcsolatban nemritkán alkalmazott hátrányos megkülönböztetések jogi szankcionálhatóságának. Különösen lakásbérleti szerződések, illetve munkaszerződések, valamint vállalkozási- és megbízási jogviszonyok létesítésénél kerülhet sor ilyen megkülönböztetésre.

Az Alkotmány [Alk. 66.§, 70/A.§] az alapvető jogok között, a Polgári Törvénykönyv [Ptk. 78.§] a külön nevesített személyiségi jogok között emeli ki a

<sup>23</sup> 66/1995. (XI.24.) AB hat.

<sup>24</sup> Részletesen a 32/1991. (VI. 6.) AB határozatban; vö.: a 66/1995. (XI. 24.) AB hat is.



nemre, fajra, színre stb. történő bármilyen diszkriminációval szembeni védelemhez való jogot. A bizonyítási nehézségektől eltekintve is fogas kérdés ugyanakkor, hogy milyen szankcióval illethető az a bérbeadó, munkáltató stb., aki nemre vagy fajra vonatkozó hátrányos megkülönböztetést alkalmazva nem köt szerződést a megfelelő szakmai és emberi alkalmasságot tanúsító munkavállalóval vagy a fizetőképese, szolid lakásbérrel. A szerződésen kívüli (deliktualis) kártérítési igény érvényesítésének (ideértve adott esetben a nem vagyoni kártérítés lehetőségét is) a Polgári Törvénykönyv szerinti tényálláselemek bizonyítottsága esetén nem lehet akadálya. Szerződéses jogviszony hiányában viszont kontraktuális szankciókra nem kerülhet sor, szerződéskötési kötelezettség – akár megzorító feltételekhez kötött – előírása pedig nyilvánvalóan szóba sem kerülhet.

Említést érdemel ebből a szempontból a BGB-nek a munkaszerződés szabályai közé iktatott megoldása [§ 611a], amely a nemre tekintettel történő hátrányos megkülönböztetés tilalmát a bizonyítási teher megfordításával és külön kártérítési szankció kilátásba helyezésével is érvényesüléshez kívánja segíteni. Eszerint ha vita esetén a munkavállaló a nemre tekintettel történt diszkriminációt valószínűsíti a munkaviszony létesítésének elmaradásával kapcsolatban, a munkáltatót terheli annak bizonyítása, hogy a munkaszerződés megkötésére egyéb nyomós okból nem került sor. Ha pedig a munkavállaló végül is felelőssé tehető a szerződés megkötésének a diszkriminációs tilalom megszegésével történt elmaradásáért, úgy ő a munkavállalóval szemben a negatív érössze megfizetésére köteles.

2. A szerződés *tartalmi szabadságának* korlátozását a jogirodalom gyakran fordított problémaként fogja föl. A kérdést sokszor akként vetik fel, hogy korlátozhatják-e a szerződő felek, s ha igen, mennyiben és miként, magánjogi ügyleteikben az alkotmányban garantált alapvető jogaikat.

Abból indulhatunk ki, hogy az alapvető alkotmányos jogokat az állam nemcsak saját szerveivel szemben garantálja, és nemcsak állami szervek jogsértése esetére ad hozzájuk jogi védelmet. Az állam alkotmányban vállalt kötelezettsége az is, hogy ezeket a jogokat a polgárok egymás közötti viszonyában is a szükséges mértékben érvényesüléshez segítse. A törvényhozó és a bíró feladata, hogy az alkotmányos alapjogok sérelmével szemben – preventív és reparatív jogi eszközökkel – álljon készenlétben a magánautonómia tartományaiban is.

Ez a problémakör különösen bonyolult jogelvi és dogmatikai kérdéseket vet fel a magánjogi szerződések világában. Itt ugyanis az alkotmányos alapjogok szembekerülhetnek a magántulajdon egyik legevidensebb jogosítványával: a szabad rendelkezés jogával, azaz a szerződési szabadság elvével. Mennyiben és – főként – milyen jogi úton emelnek gátat az alkotmányos alapjogok a magán-



tulajdonosok szabad szerződéskötési jogának? Ezt a problémát illusztrálják például a fentebb említett béranszerződések.

Újdonsága és jelentősége miatt az alábbiakban részletesen foglalkozunk azokkal a jogdogmatikai kérdésekkel, amelyek az alkotmányos alapjogoknak a magánjogi szerződéses viszonyokra történő befolyása kapcsán merülnek fel.

#### IV.

Az alkotmányos alapjogok és a magánjogi szerződések jogi kapcsolatát illetően látnunk kell, hogy a magánjogi jogalanyok nem közvetlen címzettjei az alapjogokat megállapító alkotmányos tételeknek; azok kötelezettjei az állam szervei, mindenekelőtt a törvényhozó hatalom és a bíróságok. Ebből pedig az következik, hogy az alkotmányos alapjogok közvetlenül nem kötik a magánjogi alanyokat szerződéses kapcsolataikban. A szerződő alanyokra az alapjogok magánjogi szabályok közvetítésével fejtik ki hatásukat.<sup>25</sup> Ennek megfelelően az alkotmányos alapjogok szerződéses korlátozásának megengedettsége nem attól függ, hogy maguk az alapjogok ilyen korlátozást közvetlenül megengednek-e vagy sem, hanem attól, hogy mennyiben és milyen módon közvetíti a magánjogi szabályozás az alapjogi követelményeket.

Az alkotmányos alapjogok mindenekelőtt a törvényhozóra és a polgári jogi viszonyokban ítélkező polgári bíróságokra hárítják a magánautonómia területén történő betartásukkal kapcsolatos felelősséget. A törvényhozó alkotmányos kötelezettsége, hogy oly módon szabályozza a magánjogi forgalmat, hogy az az alapjogi követelményeknek is megfeleljen. A magánjog alanyai (így a szerződő felek is) nem közvetlenül vannak tehát kötve az alapjogokhoz, hanem közvetve, a magánjog normáin keresztül.

A magunk részéről már csak a jogágak közötti munkamegosztás követelménye miatt is helyesnek tartjuk ezt a felfogást. Utalnunk kell mégis arra, hogy – főleg a német jogtudományban – szép számmal, tekintélyes szerzők, mint *Nipperdey* vagy *Steindorff*, képviselik az itt kifejtettekkel szembeni álláspontot. Felfogásuk szerint az alkotmányos alapjogoknak a magánjog alanyaira közvetlenül kihatásuk van.<sup>26</sup>

Az alkotmányjog és a magánjog részben eltérő célkitűzéseket szolgál, részben mások a normáikban védendő érdekek és – főként – eltérőek a módszereik

<sup>25</sup> Canaris: *Grundrechte und Privatrecht*, AcP, 184(1984), [201–246.] 210., 222., 245.

<sup>26</sup> Nipperdey: *Grundrechte und Privatrecht*. In: *Festschrift Molitor*. 1952. 17. skk.; Leisner: *Grundrechte und Privatrecht*. 1960. 356. skk.; Ramm: *Die Freiheit der Willensbildung – Zur Lehre von der Drittwirkung der Grundrechte und der Rechtsstruktur der Vereinigung*. 1960. 38. skk., 56 skk.; Schwabe: *Die sogenannte Drittwirkung der Grundrechte*. 1971; Steindorff: *Persönlichkeitsschutz im Zivilrecht*. 1983, 12.



is. Önmagában ezért is elkerülhetetlen – nézetünk szerint – a magánjogi szabályok közvetítő szerepe az alkotmányos alapjogok és a vagyoni forgalom szerződéses viszonyai között.

2. Jól demonstrálják a magánjogi normák közvetítő szerepének szükségességét azok a logikai hibák és tartalmi fogyatékoságok, amelyekkel az alkotmányos alapjogoknak a magánjogi szerződésekre feltételezett közvetlen kihatása („*unmittelbare Drittwirkung*”) jár.

Eltekintve attól, hogy ez a felfogás a magánjogi alanyokat (így a szerződő feleket) az alkotmányos alapjogok szempontjából kötelezettnek tekinti, a következmények is vitathatók. Kérdéses mindenekelőtt az, hogy helyes volna-e az alapjogokat korlátozó szerződéseket, mint közvetlenül tilos szerződéseket, semmisnek tekinteni, hacsak az illető alkotmányos norma kivételt nem enged. Még ennél is elfogadhatatlanabb volna, ha például az egyenjogúság alkotmányos alapjogából számos területen szerződéskötési kötelezettséget kellene levezetni; márpedig a „közvetlen hatás” tételéből ez következne. Joggal állapítják meg tekintélyes szerzők, hogy egy ilyen megoldás a magánjogi gondolkodásmóddal és a magánautonómia eszméjével összeegyeztethetetlen.<sup>27</sup>

Végül, de nem utolsósorban a „közvetlen hatás” hívei a szerződési szabadság alkotmányos korlátait (vagy fordított megfogalmazásban: az alkotmányos alapjogok szerződéses korlátozásának határait) csak alkotmányjogi elvekkel, mindenekelőtt az „*alkalmasság*”, a „*szükségesség*” és az „*arányosság*” elveivel képesek megvonni. Ez pedig a magánautonómia és a szerződő alanyok korlátozásához a jogi normák alkotmányosságának viszonyítására szánt és ennek mérésére alkalmazott elvek felhasználását jelenti.<sup>28</sup> Jól látható ez például a német Szövetségi Munkaügyi Bíróság gyakorlatában, amely – a kritikák ellenére – következetesen kitart a „közvetlen hatás” elve mellett.<sup>29</sup> Márpedig a hivatkozott alkotmányossági mércék – ahogy *Canaris* helytállóan megállapítja<sup>30</sup> – túl szigorúak és merevek a vagyoni forgalom alanyai által kötött szerződések alkotmányossági határainak közvetlen megvonásához. E felfogás szerint például az „arányosság” elve segítségével a magánjogi szerződések számos – „indokolatlan” vagy „ésszerűtlen” – kockázatvállalása utólag bíróilag korrigálható volna. (Csak zárójelben jegyezzük meg: ilyen nemkívánatos hatások magánjogi eszközök nem megfelelő alkalmazása útján is kiválthatók, amint azt a Ptk. 201.§ (2) bek.-ben biztosított megtámadási jog megengedésének egyes újabb esetei pél-

27 Dürig, in: *Festschrift Nawiasky*. 1956. 158. skk., 167. skk.; *Canaris*: i. m. 208.

28 Lerche: *Übermaß und Verfassungsrecht*. 1961. 19. skk.

29 BAG AP Nr. 25 zu Art 12 GG unter II 3, vö.: *Leisner*: i. m. 338.

30 *Canaris*: i. m. 209., 219.



dázzák.) A „közvetlen hatás” kritikusai joggal hivatkoznak arra, hogy a szerződő alanyoknak az alkotmányos alapjogok őreivé tétele a magánautonómia kiüresítéséhez vezetne.<sup>31</sup>

3. Az alkotmányos alapjogoknak a magánjogi alanyok aktusaira, így mindegyikük szerződéseire gyakorolt közvetett (a magánjog normáin keresztül kifejtett) hatásának elvét fogadja el a német Szövetségi Alkotmánybíróság gyakorlata is. Ezzel kapcsolatban viszont ismét egyetértőleg kell hivatkoznunk *Canaris* kritikai megjegyzésére: az alkotmányban védett alapjogok hatása csak a magánautonómia körében közvetett, de a magánjogi normaalkotásra (és e normák bírói alkalmazására) közvetlen és megkerülhetetlen.<sup>32</sup> Ez egyben azt is jelenti, hogy a magánjogi normáknak az alkotmányos alapjogokat megszorító következményeit alkotmányjogi (és nem magánjogi) mércével kell mérni, tehát e tekintetben a viszonyítást az „alkalmasság”, a „szükségesség” és az „arányosság” elvei tekintetében kell végrehajtani. Ehhez még azt tehetjük hozzá, hogy a magánjogi normák a magántulajdonosok érdek-összeütközéseinek elkerülését, illetve feloldását hivatottak szolgálni, s ezért az említett alkotmányossági elvek magánjogi konkretizálásánál is az ütköző magánérdekek összemérésére kerül sor.

4. Külön elemzést kívánnak ebből a szempontból a szerződési jog zömét kitevő *diszpozitív* normák. Ezek a normák ugyan – mint köztudott – csak a szerződő felek egyező akaratával szemben engedőek, s a bíróságok és egyéb állami szervek számára ugyanúgy kötelezőek, mint a jog egyéb szabályai, alkotmányos kötöttség szempontjából történő különös megítélésük mégis indokolt.

Ezt a sajátos alkotmányos elbírálást – nézetünk szerint – az a tény magyarázza, hogy a diszpozitív normákban a törvényhozó úgy törekszik a felek szerződésbeni tipikus érdekpozíciójának kiegyenlítésére, hogy az ésszerűen eljáró szerződő alanyok vélelmezhető megegyezésének feltételeit tekinti mintának. A diszpozitív normáknak ebből a tartalmi különlegességéből szokás levezetni azt a tételt, hogy az ilyen jogszabályok által az alapjogok korlátozása akkor alkotmányos, ha egy magánjogi szerződéssel is az volna.<sup>33</sup> Ez a nézet azonban – véleményünk szerint – logikailag hibás, mert ha – mint kifejtettük – a magánjogi szerződések alkotmányos korlátait az alapjogok nem közvetlenül képezik, hanem magánjogi normákon keresztül, akkor a kétségtelenül a magánjogi normák közé tartozó (szabályos állami jogalkotás keretében alkotott) diszpozitív szabályok nem kezelhetők szerződés mintájára. Ezt *Canaris* is

31 Dürig: uo.

32 *Canaris*: i. m. 211. sk., 245.

33 *Canaris*: i. m. 214.



elismeri, amikor a diszpozitív normák alkotmányossági mércéjéül alkotmányjogi elvek – a „szükségesség” és az „arányosság” – kritériumait jelöli meg.<sup>34</sup> Sokkal inkább arról van tehát szó, hogy a diszpozitív magánjogi normák és az alkotmányos alapjogok viszonyában az említett alkotmányjogi viszonyítási alapok tartalmukat – még jobban, mint a kógens természetű magánjogi tilalomfák – a közérdek és a magánérdek összemérése útján nyerhetik el.<sup>35</sup> Ez pedig mindenekelőtt azt jelenti, hogy a magánautonómiát keretező diszpozitív normák annyiban korlátozhatják az egyik fél alkotmányos alapjogát, amennyiben azt a másik fél védelme – a korlátozott szerződő partner aránytalan sérelme nélkül – megkívánja.

Igy válik ketté – nézetünk szerint – logikailag is helyesen jogszabály és jogügylet alkotmányosságának elérése: az előbbieket (tehát a magánjog kógens és diszpozitív normáit is) közvetlenül kötik az alkotmányos alapjogok korlátai; a magánautonómia szféráját, a szerződésalakító szabadságot viszont csak közvetve, a magánjogi törvényhozáson keresztül érik el a korlátok.

5. Kérdés ezek után, hogy a magánjog mely szabályai alkalmasak és alkalmazhatók a szerződési szabadság alkotmányos korlátainak közvetítésére.

Kézenfekvő mindenekelőtt a metajurisztikus értékrend befogadására, a magánautonómia szabályrendszerébe emelésére igen jól használható generálklausulák szerepe. Ha kicsit egyoldalúan is teszi, alapvetően ezt hangsúlyozza (több más szerző mellett) *Flume*, amikor az alkotmányos alapjogok magánautonómiát korlátozó hatásához a BGB 138.§-ában foglalt jó erkölcs kritériumait hívja segítségül.<sup>36</sup> Felfogásának egyoldalúsága abban áll, hogy ezt a szerepet lényegében kizárólagosnak képzei el. E generálklausulának az alkotmányos alapjogok védelmében játszott funkciójával mások is egyetértenek. *Esser/Schmidt* – más irányban túlozva – a jó erkölcsbe ütközést egyenesen azonosítja a szociális igazságtalansággal. *Mayer-Maly* is a szociális állam alkotmányos elvének tulajdonít fontos szerepet a jóerkölcs fogalmi körülhatárolásában, az egyéni alapjogok mellett.<sup>37</sup>

A BGB 138.§-ához hasonló feladat vár a magyar Ptk.-ban a „nyilvánvalóan jó erkölcsbe ütköző” szerződéseket semmissé nyilvánító rendelkezésre [Ptk. 200.§ (2) bek.]; továbbá a jogok gyakorlására és a kötelezettségek teljesítésére vonatkozó általános követelményre: a jóhiszeműség és tisztesség alapelvi szín-

<sup>34</sup> Uo.

<sup>35</sup> E tekintetben ugyanerre az eredményre jut Canaris: i. m. 215.

<sup>36</sup> *Flume*: *Allgemeiner Teil des Bürgerlichen Rechts*. 1979, 22., 324.

<sup>37</sup> Ennyiben jogos Canaris kritikája: i. m. 222. skk.; vö.: *Esser/Schmidt*: *Schuldrecht, Allg. Teil* (7. Aufl.) 163.; *Mayer-Maly*, in: *Münch-Komm* (3. Aufl.) § 138 Rn.



ten megfogalmazott elvárására [Ptk 4.§ (1) bek.]. Bizonyos esetekben a joggal való visszaélés tilalma [Ptk 5.§ (1) bek.] is segítségül hívható.

Ősi jogalkotó tapasztalat, hogy a magánjogban néhány területen elkerülhetetlen a generálklauszulák – nagyobb jogalkalmazói rugalmasságot, mérlegelési szabadságot biztosító – alkalmazása; a klauszula próbáját a mérlegelés korrektsége és az ítélkezési gyakorlat lehető egységessége jelenti.

A generálklauszuláknak az alkotmányos alapjogok védelmében a magán-autonómia körében játszott szerepét bíráló kritikák rendszerint két hibát tesznek szóvá:

- ha a törvényhozó konkrétabb szabályozás lehetősége esetén is hozzájuk folyamodik, vagy

- ha a jogalkalmazó túlságosan szélesre nyitja a klauszula által befogadható tényállások körét.

Mindkét ellenvetés helytálló. Különösen egyenlőtlen pozíciójú felek között létrejövő szerződések (pl. gyakran lakásbérletek, bankügyletek, biztosítási jogügyletek stb.) esetén nemcsak helyénvaló, hanem kifejezetten szükséges is, hogy a jogalkotó a magánjog értékrendjét és módszerét tükröző konkrét normákkal is közvetítse az alkotmányos alapjogok követelményét, mintegy a magánjog nyelvére fordítva le azokat. Ezt lehet mondani általános jelleggel is az általános szerződési feltételek felhasználásával létrejövő ügyletekre. Hasonló megoldás ajánlatos olyan szerződéses szituációkban is, amelyekben a törvényi norma valamelyik felet – *Grosschmid* kifejezésével – hatalmassági helyzetbe hozza, azaz alakító jogot biztosít számára. A konkrét dogmatikai megoldás lehet érvénytelenségi szankció (akár megtámadási jog biztosításával, akár – ha szükséges – semmisség kimondásával), lehet a szerződéses viszony egyoldalú felszámolására történő feljogosítás (ellátási, illetve felmondási jog garantálásával) stb.

Követendő például szolgálhat a svájci Ptk. rendelkezése [Art. 27. Abs. 2 ZGB], amely szerint „senki nem mondhat le szabadságáról, és nem korlátozhatja magát annak gyakorlásában a jogot vagy erkölcsiséget sértő mértékben”.

Anyagi jogi normák mellett perjogi elvek, mint pl. az officialitás kellő mérvű alkalmazása, és eljárásjogi szabályok is szerepet vállalhatnak az alkotmányos alapjogoknak a magánjogi szerződések megítéléséhez történő közvetítésében.

Ami pedig a generálklauszulák túlságosan széles körű alkalmazását illeti, szerencsétlen volna egy életveszélyes tevékenységre irányuló jogügylet (pl. alpinista épület-felújítók vállalkozási szerződését vagy sárkányrepülők megállapodását stb.) azért a jó erkölcsbe ütközőnek és semmisnek minősíteni, mert az élethez és a testi épséghez való alapvető jogokat az Alkotmány [Alk. 54.§ (1) bek., 70/D.§ (1) bek.] védi. Mindenképpen egyet kell értenünk tehát azokkal a

jogirolalmi álláspontokkal, amelyek óvnak a generálklauzulák alkalmazásának kizárólagossá tételétől a magánautonómiának és az alkotmányos jogok védelme értelmében történő korlátozásában.<sup>38</sup>

## V.

1. A magánjog utolsó félszázados fejlődésének egyik legfontosabb eszmei áramlatát kétségkívül az ún. „gyengébb fél” védelme körüli viták képezik. A probléma magját az a korántsem új keletű felismerés jelenti, hogy a magánjogi szabályozás alapvető módszertani kiindulópontjában és részleteiben is egyenlőnek tekinti a – gazdasági, szociális, képzettségi stb. szempontból – gyakran távolról sem egyenlő társadalmi lehetőségekkel rendelkező jogalanyokat. A költő intuitív zsenialitásával szólva:

„Úgy volna jó a törvény, úgy egyforma hatályu,  
ha akként gyártódnánk, mi emberek,  
akár a vályog, mit a vályu  
billiószám is egyformára vet.  
De hát ezt nem lehet.”<sup>39</sup>

A fogyasztóvédelem, a szociálisan rászorult fél védelme és más hasonló hangzatos jelszó alatt – szinte a korkívánat erejével – fellépő és ható nézetek az elmúlt évtizedekben hódítottak a világ gazdaságilag fejlettebb felében; sőt – a szokásos késéssel – az 1970-es években hozzánk is eljutottak. Megkísértették nemcsak a jogtudományt, hanem a jogalkotást és a bírői gyakorlatot is.<sup>40</sup> Számos jogágban törekszünk érvényesítésükre, így a magánjogban, sőt a klasszikus – kollíziós normákkal operáló és közvetett szabályozást nyújtó – nemzetközi magánjogban is.

Valljuk meg: a magánjognak kevés eszköze van a szociális egyenlőtlenségek kiigazítására. Túl a jogi szabályozás közös problémáján, a jog általános érvénye és az eldöntendő eset egyedi konkrétsága közötti ellentmondáson,<sup>41</sup> a magánjogban azért nehéz a szociális szempontú korrekcióra módot találni, mert a magántulajdonosok viszonyainak rendezésénél a kiinduló elv csak az egyenjogúság és a mellérendeltség lehet. Már *Arisztotelész* felhívta ugyan a figyelmet a *méltányosság* követelményére,<sup>42</sup> de a magánjogban éppen az említett kiinduló

38 Canaris: i. m. 222. skk., 240.

39 Illyés Gyula: *Óda a törvényhozóhoz*. In: *Illyés Gyula művei*. Magyar Remekírók sorozat, Szépirodalmi Könyvkiadó, Bp. 1982. 407.

40 Vö.: Vékás: *Fogyasztóvédelem a fejlett tőkés országokban*. *Gazdaság- és Jogtudomány*, XV (1981) 57–84.

41 Vö. Peschka: *Az etika vonzásában*. Akadémiai Kiadó, Bp. 1980. 16. skk., 56. sk.

42 *Arisztotelész: Nikomakhoszi etika*. Bp. 1971. 136. skk. (különösen 1135. a).



alapállás miatt ezzel a lehetőséggel is csínján kell bánni. A méltányosságnak ugyanis két oldala van: ami az egyik tulajdonosnak méltányos, az a másiknak már könnyen elfogadhatatlanul méltánytalan lehet. Mindehhez járul az alapvető célkitűzésnek és az alkalmazott kiindulási kategóriának: magának az ún. „gyengébb félnek” – bármely definíció szerint megmaradó – pontatlansága és erősen viszonylagos volta. Versenypiacon például a szociálisan elesett fél sincs a gazdaságilag erősebb félnek kiszolgáltatott helyzetben; monopolhelyzet esetében viszont a gazdasági potenciáltól függetlenül is aszimmetrikus szerződéskötési pozíciók jöhetnek létre.

2. A szerződési szabadság és az alkotmányos alapjogok viszonyának meghatározásánál a szerződéses alanyok faktikus egyensúlyának hiánya szintén sajátosan jelentkezik. Ez a különlegesség mindenekelőtt abban a kísérletben ölt testet, hogy jeles jogtudósok – Nipperdey, Gamillscheg – éppen a szociális túlsúly jogszabályi korrigálására hivatkozva törnek lándzsát az alapvető alkotmányos jogoknak a magánautonómia körében történő közvetlen érvényesítése (az „*unmittelbare Drittwirkung*”) mellett.<sup>43</sup> Ezekkel a felfogásokkal szemben a magunk részéről azok nézetéhez csatlakozunk, akik a „gyengébb fél védelme” címszó alatt sem látnak ilyen közvetlen hatásra szükségletet, illetve jogi lehetőséget.<sup>44</sup> Túl a „gyengébb fél” védelme jelszó elméletileg és gyakorlatilag egyaránt problematikus, fentebb kiemelt vonásain, a magánjogi normák közvetítésére az alkotmányos alapjogok és a magánjogi szerződések között e körben ugyanazon okból és ugyanúgy szükség van, mint a magánautonómia faktikus aszimmetriától nem terhelt világában.

3. Mindezek a fenntartások és finomítások nem jelentik azt, hogy az alkotmányos követelmények magánjogbeli érvényesítésére szociális megfontolásokból nem kellene minden jogi lehetőséget megragadni.

A német Szövetségi Alkotmánybíróság már hivatkozott ítéletei<sup>45</sup> – a körülöttük zajló éles viták ellenére – nem hagynak kétséget a tekintetben, hogy a magánjog szociális érzéketlenségét az alkotmányos alapjogok követelményei szerint fel kell oldani.<sup>46</sup> A kiskorú kezességvállalásának érvényességével kapcsolatos ügyben az ítélet indokolása kifejezetten kiemeli,<sup>47</sup> hogy a szociális állam alkotmányos elvének a magánautonómia körében is érvényt kell szerezni. Ha a szerződő felek egyike tényleges helyzetét tekintve a másiknak egyér-

43 Nipperdey, in: Bettermann/Nipperdey: *Die Grundrechte*. Bd. IV. 2, 753. skk., Gamillscheg: *Die Grundrechte im Arbeitsrecht. AcP*, 164 (1964) [385–445.] 407. skk.

44 Canaris i. m.: 206. sk.

45 L. a 17. jegyzetben.

46 Reuter: i. m. 149.; Salgo: i. m. 212., 214.

47 BVerfGE 89, 214.

telmüen alárendelt helyzetben van, és a jogviszony következményei számára rendkívül terhesek, a magánjog korrekciós eszközeivel a bírónak élnie kell. Módszertanilag egyébként a német Szövetségi Alkotmánybíróság e körben is egyértelműen az alkotmányos elveknek a magánjogi normákon keresztül történő érvényesítése mellett száll síkra. Álláspontja szerint e normáknak, illetve azok bírói értelmezésének és alkalmazásának kell az alkotmányos alapjogokat védeniük a szociális szempontok érvényesítésénél is.<sup>48</sup>

A másik oldalról vizsgálva, nem hagyható figyelmen kívül, hogy ezek az ítéletek nagyon sajátos tényállásokhoz kapcsolódnak, így a bennük kifejtett alkotmányos elvárások nem mindenben általánosíthatók a magánjog „szocializálási” követelményének megvalósításánál. Igazat kell tehát adnunk azoknak a véleményeknek is,<sup>49</sup> amelyek a szerződési szabadság elvének lehető legszélesebb körben történő érvényesülését ugyanúgy döntő társadalmi követelménynek és – ezért – alkotmányosan is védendő maximának tekintik, mint a szociális aszimmetria lehetőség szerinti magánjogi korrigálását a szerződések világában. *Medicus* – sarkított fogalmazásban ugyan – helyesen hangsúlyozza az érem másik oldalát, amikor óv attól, hogy a jog a vagyoni szempontból gyengébbeket kiskorútsa.<sup>50</sup>

A helyes arányok megállapítása, az arany középút megtalálása – nyilvánvalóan – itt sem könnyű. Meddig mehet el a jogi védelem a „gyengébb szerződő fél” védelmében? Hol van a határ az egyéni felelősségérzet csorbulása és a védelemre szorultság között? A szerződő felek közötti diszparitás milyen eseteiben avatkozhat be a jog a magánautonómia szférájába?<sup>51</sup> Ilyen és hasonló kérdések megválaszolása önmagában sem könnyű; még nehezebb rájuk az alkotmányos alapjogok és a magánjog bonyolult viszonyrendszerében feleletet adni. Mert, mint a *Flume* írja, „a magánautonómia örök dilemmája, hogy – a szerződő partnerek egyenlőtlen pozíciója miatt – ismételten kérdésessé válik.”<sup>52</sup>

## VI.

Előadásunk azt kívánta érzékeltetni, hogy azok az államok, amelyeknek a történelmi körülmények nagyobb társadalmi törések nélküli, viszonylag békés és szerves átalakulásra adtak módot, példákkal és alkalmazható mintákkal szolgál-

48 BVerfGE 7, 198.

49 L. az 5. jegyzetben i. m.

50 *Medicus*: i. m. 61. skk.

51 Vö. Salgo: i. m. 214.; Höfling: i. m. 61.

52 *Flume*, in: *Festschrift 100 Jahre Deutscher Juristentag*. I. 143., idézi Salgo: i. m. 215. és 73. jegyzet.



hatnak a szerződési szabadság alkotmányos kereteinek kialakításához is. Azoknak az államoknak viszont (s ezek közé tartozik Magyarország is), amelyektől a történelem kegye a szervesebb, folyamatosabb társadalmi változások lehetőségét megtagadta, nem kell szégyenkezniük, ha – szükségből erényt kovácsolva – okulnak a előttük járók tapasztalataiból.

Ismételten hangsúlyozni szeretnénk, hogy fejtegetéseink háttérében egy hosszú távon is alapvető társadalmpolitikai kérdés megválaszolásának igénye húzódik meg. E kérdés lényege: hol legyenek magántulajdon és magánautonómia közérdekű (ha tetszik: szociális) határai a vagyoni forgalom szerződéses viszonyaiban?

Bevezetőnkben a múlt század egyik nagy magyar gondolkodóját, Kemény Zsigmondot idéztük. Fejtegetéseink lezárásaként hadd forduljunk *Bibó István*hoz, századunk kiemelkedő társadalomkutatójához! *Az európai társadalomfejlődés értelme* című tanulmányában Bibó azt a megállapítást teszi, hogy az európai történelemben „kizárólag az nevezhető fejlődésnek és jövőbe mutatónak, ami az embert embertől gyötrő félelem feloldása és ennek legfőbb eszközeként a társadalmi technikák humanizálása, racionalizálása és moralizálása felé mutat”.<sup>53</sup>

Ezen eszme jegyében választottuk akadémiai székfoglalónk tárgyát; s e gondolat érvényességét kívántuk bizonyítani a szerződési szabadság és az alkotmányos alapjogok kapcsolatának tárgyalásával. Hadd köszönjük meg megtisztelő figyelmüket is a vele történő azonosulás megvallásával.

---

<sup>53</sup> Bibó: Az európai társadalomfejlődés értelme. In: *Válogatott tanulmányok* 3. kötet. Magvető Könyvkiadó, Bp. 1986. [5–123.] 120.





Rézler Gyula

az MTA külső tagja

# AZ ARBITRÁLÁS SZOCIOLÓGIÁJA

Elhangzott 1998. december 1-jén

**E**lsősorban köszönetemet szeretném kifejezni azért, hogy az Akadémia megtisztelt külső taggá való választásommal. Ugyancsak köszönettel tartozom Kulcsár Kálmán akadémikusnak és dr. Cseh-Szombathy László levelező tagnak, akik tagságra ajánlottak.

1998 nemcsak azért fog emlékezetes maradni számomra, mert ebben az évben ért ez a megtiszteltetés, hanem azért is, mert éppen 60 évvel ezelőtt jelent meg első könyvem *A magyar nagyipari munkásság kialakulása* címmel. Tíz évvel később, vagyis fél évszázaddal ezelőtt publikáltam a *Bevezetés a szociológiába* című kézikönyvet. A koromra tett fenti utalások arra mutatnak, hogy ha az ember elég hosszú ideig él és ír, még akadémikus is lehet belőle.

Előadásom címe: *Az arbitráls szociológiája*. Az arbitráls a munkaügyi viták egyik elintézési módja. A felek által választott arbitrátor, magyarul döntőbíró, az eléje terjesztett vitás ügyet végleges érvénnyel dönti el.

Előadásomban azokat a társadalmi szerkezeteket és viszonyokat vizsgálom meg, amelyek a társadalmon belül az arbitrátor helyét és szerepét kijelölik. Ezt követően az arbitrátor funkcióival és az azokat körülíró társadalmi tényezőkkel fogok foglalkozni, beleértve a kormánysszervek és a bíróságok fokozódó aktivitását. A harmadik rész azokat a dinamikus társadalmi és gazdasági tényezőket mutatja be, amelyek az elmúlt 50 év alatt az amerikai arbitrátor helyzetében és funkcióiban sokszor alapvető változásokat okoztak.

Végül az arbitrátorok értékrendszerét és annak döntéseikre gyakorolt hatásait tekintem át.

A rendelkezésemre álló időre való tekintettel, előadásom csak az első, a harmadik és a negyedik részre terjed ki.

Először a munkaviszonyban létező érdekellentétekkel és az azokból eredő konfliktusokkal fogok foglalkozni, amelyek az arbitráls intézményét szükségessé tették.

## Érdekellentétek és az azokból eredő konfliktusok az ipari munkaviszonyban

A szociológia általában a társadalom szerkezetével, az e szerkezetet alkotó csoportokkal és e csoportok között kialakult viszonyokkal, illetve az e viszonyokat meghatározó és megváltoztató tényezőkkel foglalkozik. A társadalmi szerkezetet elsődleges és másodlagos csoportok alkotják. Az utóbbiak kategóriájában azokat a csoportokat találjuk, amelyek között társadalmi viszony létesül abból a célból, hogy bizonyos társadalmilag fontos funkciókat együtt teljesítsenek.<sup>1</sup> Az ilyen csoportok funkcionális viszonyban vannak egymással. Számos esetben ez elkerülhetetlen, mert a társadalmi fontosságú feladat sikeres elvégzéséhez mindkét csoport hosszú lejárátú együttműködése feltétlenül szükséges.

A továbbiakban két, másodlagos társadalmi csoport, úgymint a vállalatok és a munkavállalók viszonyával és az e viszonyban felmerülő viták és ellentétek békés megoldására irányuló szervezetekkel és eljárásokkal foglalkozom. A másodlagos csoportok korábbi meghatározása szerint mind a munkaadók, mind a munkavállalók viszonya azt a célt szolgálja, hogy egy meghatározott gazdasági feladatban, vagyis a javak termelésében és a szolgáltatások nyújtásában közösen vegyenek részt. Az ilyen csoportok viszonyát az állandóság jellemzi, éppen ezért természetes az, hogy kommunikációs csatornák és a hatalom megszólását szabályozó elvek létrehozására törekedjenek.<sup>2</sup>

A funkcionális viszonyban lévő csoportoknak szükségszerűen közös céljaik és érdekeik vannak, mégpedig az, hogy az együtt vállalt feladatot sikeresen teljesítsék. Ugyanakkor a funkcionális viszonyban lévő csoportok tanulmányozása arra a konklúzióra vezet, hogy ezeken a viszonyokban a közös érdekekkel párhuzamosan érdekellentétek is felmerülnek.

A munkaadók és a munkavállalók között elsősorban a termelési tevékenységből eredő jövedelem elosztásával és a foglalkoztatottak munkafeltételeinek meghatározásával kapcsolatban keletkezhetnek érdekellentétek. A társadalom-

<sup>1</sup> Basis, Gelles, Levine: *Sociology*. 2nd ed., Random House, 1984. 183.

<sup>2</sup> Uo.



történet tanulsága szerint a funkcionális gazdasági csoportok közötti érdekellentétek megoldatlansága – amennyiben az elhúzódó konfliktusok a közös funkció időleges megszakításához vezetnek – káros következményekkel járhat. Annak érdekében, hogy a konfliktusok káros következményeit elkerüljék, a munkaadói és munkavállalói csoportok az idők folyamán olyan szervezetek és eljárások létrehozására törekedtek, amelyek az érdekellentéteikből származó konfliktusaikat megoldják, mielőtt azoknak a kirobbanása mindkét csoportnak súlyos kárt okozna.

Mielőtt továbbmennénk, az érdekellentét és a konfliktus fogalmainak tisztázására van szükség, főleg azért, mert azokat a közhasználatban azonos jelenségekre alkalmazzák. Két funkcionális csoport érdekellentéte állandó és hosszú lejáratú jelenség. Ezzel szemben a konfliktus, ami ugyan érdekellentétből eredhet, ideiglenes és egyedi előfordulást képez, aminek a békés elintézésére a funkcionális csoportok különböző eljárásokat szerveznek.

Talán nem érdemtelen megemlítenem, hogy a szociológiai irodalomban a konfliktussal foglalkozó tanulmányok tágas teret foglalnak el. Az amerikai szociológusok a 19. század végén és a 20. század elején a konfliktusok jelenségének központi fontosságot tulajdonítottak. A második világháborút követő évtizedekben az e téma iránti érdeklődés újra feléledt, ahogy ezt Robert Merton, Kenneth Boulding, Elton Mayo munkái bizonyítják. Legújabbban a konfliktus szociológiai elméletét Coser, Fink és Moscovici fejlesztették tovább.<sup>3</sup>

Az elméleti eszmefuttatásokból a konfliktusok osztályozása vonatkozhat némileg tárgykörömrre is. Az irodalom szerint a vállalatvezetés és szervezett alkalmazottai között fennálló ellentéteket a következő kritériumok jellemzik: először ezek az ellentétek gazdasági jellegű konfliktusok, amennyiben a nemzetgazdaság ipari szektorában fordulnak elő. Kenneth Boulding véleménye szerint a szóban forgó konfliktus nem kizárólag gazdasági természetű, mert sokszor a nem pénzügyi viták éppen olyan fontosak, mint az anyagi juttatásokkal kapcsolatosak. Másodszor az ipari viták racionális természetűek, amennyiben az egyik csoport viselkedése és taktikája a másik csoport hasonló jellegű magatartására reagál. Végül az ipari konfliktusok rendszerint pozitívak, eredménnyel végződnek, mert a vitaelintézés során hozott kompromisszumos megoldás általában mindkét felet kielégíti.

Itt kell rámutatnom arra, hogy általában csak a kapitalista és félkapitalista gazdasági rendszerekben ismerték el az ipari munkaviszonyban felmerülő érdekellentéteket és az azokból eredő konfliktusok létezését. A korábbi kommunista ideológia szerint egy ún. szocialista gazdasági rendszerben érdek-

---

3 Moscovici, Doise: *Conflict and Consensus*. Sage Publ., London, 1994.



lentétek a termelésben résztvevő csoportok között már azért sem merülhetnek fel, mert az ipar és a munkások érdekei azonosak. A dolgozók tudatában vannak annak, hogy a termelési eszközök az ő tulajdonukban vannak. Miután a kommunista ideológusok nem ismerték el azt, hogy a termelésben részt vevő csoportok között érdekellentétek létezhetnek, feleslegesnek tartották, hogy a dolgozók érdekeinek védelmére külön szervezeteket és eljárásokat hozzanak létre.

Magyarországon is ez a felfogás uralkodott egészen 1968-ig. Az ezt követő években Gáspár Sándor és más kommunista ideológusok belátták, hogy egy szocialista gazdasági rendszeren belül is támadhatnak érdekellentétek a termelési egységek és az ott dolgozó alkalmazottak között. Ezért a pártvezetés szervezeteket állított fel a konfliktusok elintézésére. Tudomásom szerint a vállalatok keretében működő arbitrálsági bizottságok sikeres munkát végeztek a felmerülő ipari viták elintézésének terén.<sup>4</sup>

Miután csak a kapitalista rendszerben van arra lehetőség, hogy az ipari viták békés elrendezését intézményesítsék, a továbbiakban az e rendszerben kialakult vitaelintézési modellek elemzésére fogok szorítkozni. Ugyanis a kapitalista rendszerben működő vállalatok és alkalmazottak külön viszonyt létesítettek, aminek az az egyetlen és kizárólagos feladata, hogy konfliktusait békésen megoldja anélkül, hogy abból a feleknek kára származnék.

Azokat a szervezeteket és eljárásokat, amelyek kizárólag a konfliktusok békés megoldását szolgálják, Amerikában Industrial Relations néven foglalják egybe. E fogalom szó szerinti magyar fordítása ipari munkaviszonynak felelne meg. De véleményem szerint a magyar terminológia sokkal tágabb értelmű, mint az Industrial Relations amerikai jelentése. Az ipari munkaviszony magyar értelmezése nemcsak az ipari konfliktusok elintézésére felállított szervezetek összességét jelenti, hanem a vállalatok szervezett és szervezetlen alkalmazottai között fennálló egyéb ügyeket is. Amerikában a konfliktusok elintézését szolgáló rendezések kevés kivétellel csak olyan helyzetekben léteznek, ahol az alkalmazottakat szakszervezetek képviselik a vállalatvezetéssel szemben. Ezért annak a speciális viszonnak a meghatározására, amelyet a felek vitáik békés elintézésére létrehoztak, magyarul a kollektív munkaviszony kifejezést ajánlom. Megjegyzem, hogy az utóbbi időben néhány amerikai vállalat, ahol az alkalmazottakat szakszervezetek nem képviselik, szintén bevezette az arbitrálság intézményét a vállalat és az egyes alkalmazottak közötti munkaügyi viták elintézésére.

A fejlett tőkés államok elfogadták a munkaügyi kapcsolatokban keletkező konfliktusok tényét. Ez azonban nem jelenti azt, hogy a konfliktusok elintézését

<sup>4</sup> Rézler: Resolution of Industrial Disputes in Hungary. *The Arbitration Journal*, Sept. 1985.



szolgáltató szervezeti és eljárási megoldások is azonosak lennének. Ezen a téren két szélsőséges modell és számos átmeneti típus is található. Az egyik végletet azok az államok jelentik, például Svédország, amelyek az ipari viták elintézését kizárólag a kormánysszervezetekre, elsősorban a bíróságokra bízzák. A másik végletet az Egyesült Államok reprezentálja, ahol a kollektív munkaviszonyt képező két csoport megegyezett abban, hogy vitáikat a bíróságok kihagyásával vagy egymás között vagy egy semleges magánszemély bevonásával intézik el.

A munkaügyi viták elintézésére az Egyesült Államokban négy alapvető modell alakult ki: 1) a vállalatban belüli panasz eljárás, 2) az egyeztetés, 3) a ténymegállapítás és végül 4) az arbitráls. Az egyes eljárásokat az különbözteti meg egymástól, hogy döntéshozatali autonómiájukat milyen mértékben adják fel egy harmadik személy javára.

A *vállalatban belüli panasz eljárás* a feleknek teljes autonómiát biztosít, amennyiben rájuk múlik, hogy a vita elintézésében megegyeznek-e vagy sem. A felek a közvetítés esetében is megtartják döntési jogaikat. Autonómiájuk foka azonban csökken, mert egy kívülálló, semleges személyhez fordulnak, hogy vitájuk elintézésében segítségükre legyen. Ez a körülmény befolyást enged az egyeztetőnek. A *ténymegállapítási eljárást* a felek kizárólag érdekvitájuk megoldásának érdekében használják. A ténymegállapító javaslatát a feleknek joguk van elfogadni, módosítani vagy elvetni. Mindazonáltal e javaslatoknak lényeges szerepük van az érdekvita eldöntésében.<sup>5</sup>

Amennyiben a fenti eljárásoknak egyike sem vezet a felek vitájának elintézésére, akkor *arbitráls*hoz fordulhatnak. Ebben az esetben a felek feladják döntési jogaikat, s miután kötelezik magukat arra, hogy az arbitrátor döntését elfogadják és végrehajtják, lemondanak autonómiájukról.

A továbbiakban elsősorban az amerikai modellre fogok támaszkodni, azzal a feltevéssel, hogy az így kialakított koncepció keret némi módosítással alkalmazható lesz a többi kapitalista gazdasági rendszerben fennálló kollektív munkaviszony és az ebből eredő ellentétek megvizsgálására.

## Az arbitrátor helye és szerepe a munkaügyi kapcsolatokban

Ebben a részben a kollektív munkaviszonnyal és a munkaügyi döntőbíróval e viszonyon belül elfoglalt helyével és szerepével fogok foglalkozni. Erre azért van szükség, mert az arbitráls folyamata a kollektív munkaviszony keretén belül megy végbe.

<sup>5</sup> Rézler: A munkaügyi konfliktusok rendezésének amerikai modellje. In: *Arbitráls amerikai módra*. Szerk. Ladó Mária. Munkaügyi Kutató Intézet, Bp. 1994. 4–5.



Az arbitrátor szerepe lényegesen különbözik aszerint, hogy a felek milyen természetű vita eldöntésével bízzák meg. Más szerepe van például, amikor egy érdekvita eldöntésére választják, mint amikor a meglévő szerződés megsértéséből eredő jogvita elintézése a feladata.

Érdekviták arbitrálására akkor kerül sor, amikor a felek régi kollektív szerződése lejár, és nem tudnak megegyezni az új szerződés feltételeiben. Ilyen esetben a választott arbitrátor funkciója az, hogy a felek helyett az új szerződésük bizonyos rendelkezéseit megállapítsa. Szakértők szerint az arbitrátornak az érdekviták terén kiejtett szerepe kvázi törvényhozó jellegű. Ezzel szemben a jogvitákban az arbitrátor szerepe inkább egy bíróhoz hasonlít.

A következőkben az arbitrátornak a jogvitákkal kapcsolatos működésével fogok foglalkozni, elsősorban azért, mert az Egyesült Államokban az arbitrási esetek több mint 90%-a ebbe a kategóriába tartozik. A jogvitát egy meglévő kollektív szerződés keretén belül kell eldöntenie.

A munkaügyi kapcsolat a gazdasági rendszeren belül történő termelési folyamat következménye. Ez speciális viszony, amit a vállalatvezetés és a szakszervezet azzal a céllal hozott létre, hogy a munkavállalók munkafeltételeit e viszony keretében meghatározzák, és hogy a felek között felmerült vitákat a termelési folyamat megszakítása nélkül megoldják.

John Dunlop, a Harvard egyetem professzora és az amerikai Industrial Relations elismert szakértője, háromfajta viszonyra mutatott rá, amelyek a kollektív munkaviszonnyal kapcsolatban léteznek: a) a kollektív munkaviszony kapcsolata a társadalom egészével, b) annak viszonya a gazdasági rendszerhez, c) a felek közötti viszony.<sup>6</sup> Ebben az értekezésben elsősorban az utoljára említett viszonyon lesz a hangsúly.

Azokat a célokat, amelyek megvalósítására a kollektív munkaviszony létrejött, a felek a kollektív szerződés keretében törekednek elérni. Itt érdemes megjegyezni, hogy amíg a termelési funkció elvégzésében a vállalatvezetésnek az alkalmazottak feletti fennhatóságát senki sem vonja kétségbe, addig a kollektív munkaviszony terén az ott folytatott tárgyalások és az azt követő szerződés végrehajtásában az alkalmazottakat képviselő szakszervezetek, legalább elvben, egyenrangúak a vállalatvezetéssel. Mikor a szerződést tárgyalják, vagy mikor annak rendelkezéseit – beleérte a viták elrendezésére vonatkozó eljárást – végrehajtják, a két fél ugyanazon a hatalmi szinten működik.

A kollektív szerződés aláírásával a vállalatvezetés beleegyezett – többek között – a munkaügyi viták elintézését szolgáló eljárások elfogadásába. Ugyanakkor *quid pro quo*ként a szakszervezet kötelezettséget vállalt arra, hogy a szer-

6 Kerr, Dunlop, Harbison, Myers: *Industrialism and Industrial Man*. Harvard Univ. Press, 1960. 234–235.



ződés tartalma alatt nem kezdeményez sztrájkot. A vita elintézési eljárása alkalmat nyújt arra, hogy a szerződés állítólagos megsértéséből eredő jogvitákat egymás között békésen intézzék el. A statisztika szerint a jogviták 90%-ában a felek egymás között megegyezésre jutnak, és csak abban az esetben fordulnak arbitráláshoz, amikor a belső eljárás sikertelennek bizonyult.

Ugyancsak a kollektív szerződésnek a viták elintézésével foglalkozó fejezetében találjuk azokat az intézkedéseket, amelyek az arbitrátor szerepét, működésének határait és a felekhez való viszonyát meghatározzák. A legtöbb kollektív szerződés kimondottan limitálja az arbitrátor hatáskörét a szerződés interpretálására és annak a szóban forgó ügyre való alkalmazására. Számos kollektív szerződésben megtalálható az a megkötés, amely szerint az arbitrátornak tilos a meglévő rendelkezésekhez bármit is hozzáadni vagy azokat a saját elképzelése szerint módosítani.

Miután az arbitrálás létjogosultsága és hatásköre a kollektív szerződésen alapul, az arbitrátor szerepét elemző tanulmányok úgy jellemzik az arbitrátort, mint a kollektív szerződés megkötő felek kreatúráját vagy éppen azoknak a kiszolgálóját. Eszerint az arbitrátor szerepét passzivitás és korlátozott tevékenység kellene hogy jellemezze. Elvben az arbitrátor szerepe és működésének határa meglehetősen korlátozottnak tűnik, a valóságban azonban sokkal tágabb.

Ennek több oka van. Mindenekelőtt az, hogy a kollektív szerződés csak általában határozza meg a felek közötti viszonyt és együttműködésük feltételeit. Ugyanis nincs lehetőség arra, hogy egy 30–50 oldalas felöllelő szöveg kiterjedjen minden sajátos helyzetre, ami a gyakorlatban előfordulhat. Ezenkívül a szerződés egyes rendelkezéseinek jelentése nem mindig világos és egyértelmű. Bonyos esetekben a felek szándékosan fogalmazták meg homályosan, mert nem tudtak megegyezni az egyértelmű jelentésben. A valóságban tehát az arbitrátorok jelentős diszkrecionális hatáskört élveznek. Abban az esetben ugyanis, ha a szerződés rendelkezései nem világosak vagy félreérthetők, az arbitrátornak lehetősége nyílik arra, hogy a saját belátása szerint értelmezze és az előtte lévő ügyre alkalmazza.

Az arbitrátor szerepét és a felekhez való viszonyát annak eseti jellege is meghatározza. Amíg az arbitrálás intézménye a kollektív szerződés szerves része, és az is marad, amíg a felek közötti kollektív szerződés életben van, addig a választott arbitrátornak a hatásköre rendszerint csak egy vagy két ügyre terjed ki. Mihelyt azokban az ügyekben, amelyeknek elintézésével a felek megbízták, az arbitrátor meghozta döntését, a felekkel való viszonya megszakad addig, amíg egy újabb vitaügy eldöntésére fel nem kéri, feltéve, hogy meg voltak elégedve tárgyalási módjával és döntésének megokolásával. Éppen ezért az esetek



90%-ában *ad hoc* arbitrálsról beszélhetünk. A fennmaradó 10%-ban a felek a kollektív szerződés időtartamára egy vagy több arbitrátort választanak, akiket rotációs alapon osztanak be a felmerülő ügyek tárgyalására. Az arbitrátorok *ad hoc* pozícióját szembeállíthatjuk a bírói kinevezések állandóságával, akiket egy életre vagy több évtizedre neveznek ki.

Az arbitrátornak a felekhez való ideiglenes viszonyát az a körülmény is egyértelművé teszi, hogy amikor a felek a vitás ügyüket arbitrálásra bocsátották, de az még tárgyalás alatt van, bármikor joguk van arra, hogy az ügy elintézésében egymás között megegyezzenek, és az arbitrátort megbízatása alól azonnali hatállyal felmentsék.

Egy arbitrátornak természetesen nemcsak az a szerepe, hogy az eléje terjesztett ügyet gyorsan és elfogulatlanul eldöntse, hanem az is, hogy döntése a felek hosszú távú viszonyát ne érintse károsan, sőt, azoknak az arbitrálastól várt igényeit kielégítse. Az arbitrátornak figyelembe kell venni azt, hogy a panasz-eljárás nem tisztán pereskedési ügy. A felek hosszú távú együttműködést építettek ki, és annak a megőrzése fontosabb számukra, mint egy ügynek a megnyerése. Tisztában vannak azzal: hosszú távú viszonyukat elsősorban az szolgálja, hogy a vesztes fél méltányos és tiszteletteljes elbánásban részesüljön.<sup>7</sup>

Harry Schulman mutatott rá arra, hogy az arbitrálás a munkaügyi önkormányzás integrális tényezője. E kereteken belül az arbitrátor segíti a vállalatvezetést abban a céljában, hogy növelje a termelékenységet. Ugyanakkor támogatja a szakszervezeteket abban, hogy részt vegyenek a vállalatnak az alkalmazottaikat illető politikájában. Végül gondot kell fordítania arra is, hogy a munkavállalók igazságos bánásmódban részesüljenek.

M. Joseph arbitrátor az Arbitrátorok Nemzeti Akadémiájának egyik konferenciáján tartott előadásában körvonalazta azokat az igényeket, amelyeknek kielégítését a felek az arbitrálási folyamattól elvárják. Először felsorolta azokat a vállalati célokat, amiknek elérését az arbitrálás előmozdíthatja:

1. A szabálytalan sztrájkok számának csökkenése.
2. A vállalatvezetés hatáskörének megőrzése azokon a területeken belül, ahol a kollektív szerződés a vállalatvezetés jogait nem korlátozza.
3. A termelékenység növekedésének előmozdítása azáltal, hogy az arbitrátorok döntései az igazolatlan távolmaradás mértékét csökkentik.
4. Az arbitrálás hozzájárulhat ahhoz, hogy a felügyelők szerepüket és az alkalmazottak felett gyakorolt felügyelet korlátait jobban megértsék.

<sup>7</sup> Dunford: 38th Annual Proceedings of the National Academy of Arbitrators. *NAA*, 1985. 140.



5. A panaszjelzés, beleértve az arbitráls, kommunikációs csatornát teremt a vállalatvezetés és a szakszervezet között, ami elősegíti mindkét fél céljainak kölcsönös megértését és figyelembevételét.<sup>8</sup>

A szakszervezetek elsősorban azt várják az arbitráls intézményétől, hogy mind az ő, mind tagjaiknak a szerződés által biztosított jogait fenntartsa. De további igények kielégítésére is jogot formálnak:

1. Megegyeznek a vállalatvezetéssel abban, hogy az arbitráls egyik feladata a törvénytelen sztrájkok korlátozása. Ez azért fontos a szakszervezeteknek, mert az ilyen sztrájktevékenység csökkenti a szakszervezetnek a tagok feletti kontrollját, valamint a szervezet erejét és tekintélyét.

2. Az arbitráls segít abban, hogy meghatározza a vállalatvezetés korlátait.

3. Az arbitráls során a szakszervezetnek alkalma nyílik arra, hogy szerepét a munkakörnyezet kontrollálásában tagjainak megmutassa.

4. A szakszervezet megerősítheti a tagjaival való kapcsolatot azáltal, hogy még az esélytelen ügyekben is képviseli őket.

5. Az arbitrálsban való részvétel során a szakszervezet tisztségviselői jobban megértik a munkaviszony problémáit és a vállalatvezetés elsődleges céljait.

6. Végül az arbitráls a szakszervezet vezetőségének lehetővé teszi, hogy a vállalatvezetéssel a vállalat különböző szintjén kommunikálhasson.<sup>9</sup>

Miután a feleknek számos célja és igénye egymással ellentétes, az arbitrálnak kell azokat egy kompromisszumos megoldásban feloldania anélkül, hogy döntésének integritását veszélyeztetné.

Az arbitrálsból az egyéni panaszosnak még akkor is haszna van, ha a döntés ellene szól. Az igaz, hogy a panaszt a szakszervezet terjeszti elő, és a panaszjelzés során is ő képviseli az alkalmazottakat. Ugyanakkor az egyénnek, akinek a kollektív szerződésből eredő jogait a munkáltató állítólag megsértette, az arbitráls alkalmat ad arra, hogy panaszát a tárgyalás során előadja. Azáltal pedig, hogy véleményét kifejtheti, az egyén számára az arbitráls katarzisként működik.<sup>10</sup>

Ezzel kapcsolatban az amerikai irodalomban vita folyik arról, hogy az egyéni panaszos és a szakszervezet érdekei mindenben és mindenkor megegyeznek-e egymással, és ha nem, akkor az egyénnek milyen lehetősége van arra, hogy érdekeit megvédje;<sup>11</sup> A Nemzeti Munkaügyi Kapcsolatok Bizottsága (National Labor Relations Board), mely kormánysszervezet, és a kollektív munkavi-

<sup>8</sup> Joseph: 32th Proc., N44, 1979. 167–169.

<sup>9</sup> Joseph: uo. 170–172.

<sup>10</sup> Abrams, Nolan: 46th Proc., N44, 1993. 270–275.

<sup>11</sup> Dunford: 38th Proc., N4 A, 1985. 5.

szonyra vonatkozó törvényi rendelkezések végrehajtását felügyeli, valamint a Szövetségi Legfelsőbb Bíróság több esetben úgy döntött, hogy az illető szakszervezet nem képviselte megfelelően tagjait, és az elmarasztalt szakszervezeteket arra kötelezték, hogy a megsértet tagoknak kártérítést fizessen.

A kollektív szerződéseken kívül a bíróságok döntései is hozzájárultak ahhoz, hogy az arbitrátorok szerepét és funkcióit meghatározzák. A bírósági beavatkozásra olyan esetekben került sor, amelyekben az egyik vagy másik fél kétségbe vonta az arbitrátor hatáskörét, vagy megtagadta döntésének végrehajtását. Ilyen esetekben az a fél, amelynek a kárára szolt a döntés, vagy az arbitrálásra igényt tartott, jogorvoslásért bírósághoz fordult. Ezek közül néhány fontosabb ügy a Szövetségi Legfelsőbb Bírósághoz került, amely döntéseiben kodifikálta az arbitrálás és az arbitrátorok közjogi helyzetét és hatáskörét. Általában megállapíthatjuk, hogy ezek a döntések többnyire megerősítették a kollektív szerződésnek az arbitrálásra vonatkozó rendelkezéseit és az arbitrátor döntésének véglegességét.

A Legfelsőbb Bíróság először 1960-ban az ún. acél-trilógiában foglalkozott az arbitrálás jogi helyzetével. A név onnan ered, hogy mind a három ügyben acélgyárak voltak az alperesek. E döntésekben a bíróság hangsúlyozta az arbitrálás fontosságát a nemzeti munkaügyi politika területén. Többek között kiemelte, hogy az arbitrálás:

- előmozdítja az ipari munkavíták gyors elintézését;
- a viták elintézésének informális módját jelenti;
- az arbitrálás gyógyító hatású abban az értelemben, hogy az alkalmazottaknak lehetővé teszi, hogy panaszukat nyilvános fórumon egy semleges személy jelenlétében adják elő;
- a vitát olyan személy dönti el, akit a felek önkéntesen választottak, és ezért megbíznak benne;
- az arbitrálási eljárás rugalmas és a felek körülményeihez alakítható.<sup>12</sup>

A Legfelsőbb Bíróság azt is hozzátette, hogy a fent sorolt okok következtében az arbitrálás alkalmasabb az ipari munkavíták eldöntésére, mint a bíróságok. Ezért a bírók nem interferálhatnak az arbitrátorok döntésével, hacsak az bizonyos elveket nem sért. A Legfelsőbb Bíróság rámutatott azokra a helyzetekre is, amikor az arbitrátor döntése nem fogadható el. Elsősorban is az arbitrátor korlátozva van a kollektív szerződés értelmezésére és alkalmazására. Ha attól eltér, döntése elveszti jogérvényességét. Az arbitrátornak természetesen arra sincs joga, hogy döntésében saját felfogásának hangot adjon, ha az kívül

12 American Manufacturing Co., 80 S. Ct. 1343 (1960); Warriors and Gulf. Nav. Co., 80. S. Ct. 1347 (1960); Enterprise Wheel Corp., 80 S. Ct. 1358 (1960).



esik a kollektív szerződés keretein. Vagyis az arbitrátor döntése addig jogerős, amíg a kollektív szerződés lényege szerint jár el.<sup>13</sup>

További döntéseiben a Legfelsőbb Bíróság az arbitrátornak majdnem teljes szabadságot biztosított az arbitrálási eljárás felett. A bíróság az ún. *Misco* döntésében még olyan messzire is elment, hogy az alsóbb fokú bíróságok még abban az esetben sem semmisíthetnek meg egy arbitratori döntést, ha az arbitrátor a kollektív szerződés értelmezésével kapcsolatban hibát követett el, mindaddig, amíg a szerződés keretein belül marad.<sup>14</sup>

A Legfelsőbb Bíróság természetesen meghatározta azokat a helyzeteket is, amelyekben a bíróságok jogosultak arra, hogy egy arbitratori döntést hatályon kívül helyezzenek. A Legfelsőbb Bíróság a következő példákkal illusztrálta az ilyen helyzeteket:

- ha az arbitrátor döntésében nem veszi tekintetbe a kollektív szerződés rendelkezéseit vagy ellentmond azoknak;

- ha az általános jogok megsértését eltűri. Például egy arbitratori döntés nem térhet napirendre afelett, hogy egy alkalmazott molesztálta kolléganőjét;

- ha az arbitrátor nem tesz eleget annak a követelménynek, hogy döntése a vitás ügyet teljesen vagy véglegesen rendezze;

- ha az arbitrátor döntése a kollektív szerződésben adott felhatalmazás keretén kívül esik, különösen akkor, ha egy fegyelmi büntetés mértékét a szerződés idevonatkozó rendelkezéseinek figyelmen kívül hagyásával változtatja meg.<sup>15</sup>

Végül annak érdekében, hogy az arbitrátor minden megfélemlítés nélkül hozhassa meg döntését, a Legfelsőbb Bíróság megállapította, hogy amikor egy arbitrátor hivatalos funkcióját végzi, akkor a bírókhhoz hasonlóan immunitásra jogosult. Vagyis a vesztes fél nem indíthat ellene kártérítési vagy becsületsértési pert. Ezzel a bíróság elismerte, hogy az arbitrátorok a bírókhöz hasonló feladatot végeznek.<sup>16</sup>

## Az arbitrálás dinamizmusa

A következő részben azokat a társadalmi és gazdasági fejleményeket veszem szemügyre, amelyek az elmúlt évtizedekben dinamikusan hatottak az arbitrálás intézményére.

<sup>13</sup> Uo.

<sup>14</sup> *Paperworkers v. Misco, Inc.*, 484 U. S. 29, 126.

<sup>15</sup> *Abrams: 41st Proc., NAA*, 1988. 317.

<sup>16</sup> *Nolan, Abrams: 40th Proc., NAA*, 1987. 49.

Az arbitrálás, csakúgy, mint a többi társadalmi intézmény, változásnak van kitéve. A kollektív munkaviszony keretében alkalmazott vitaelintézési eljárás az Egyesült Államokban több mint 50 éves múltra tekinthet vissza. Ez alatt az aránylag rövid időszak alatt is jelentős változások történtek mind az arbitrátor szerepében, mind a társadalmi és jogi rendszerben elfoglalt helyzetében.

Miután az arbitrálás a kollektív munkaviszony szerves része, ezért azok a dinamikus társadalmi erők, amelyek e munkaviszonyra és az ott folyó kollektív tárgyalásokra hatottak, az arbitrálást is hasonló mértékben érintették. A második világháborút követő három évtizedben ezek az erők pozitív irányban módították elő a kollektív munkaviszony és az arbitrálás alakulását. A gazdasági fellendülés különösen a fogyasztási cikkek előállító, tömeggyártó gyáriparkok növekedéséhez járult hozzá, amelyek tradicionálisan a szakszervezetek melegegységét jelentették. A második világháború alatt megszokott együttműködést a vállalatok és szakszervezetek a béke éveiben is tovább folytatták. Az inflációs gazdaság lehetővé tette azt, hogy a vállalatok kielégítsék a szakszervezetek bérköveteléseit, mert alkalmuk volt a többletköltségeket magasabb árakkal kompenzálni.

A fenti tényezők eredményeképpen a második világháború végétől körülbelül a hetvenes évek közepéig terjedő időszakot a szakszervezetek és az arbitrálás aranykoraként jellemezhetjük az amerikai munkaügyi kapcsolatok történetében. Azonban a század hetedik évtizedében a szakszervezetek és a kollektív munkaviszony helyzetében drámai változások történtek. Azok a gazdasági és társadalmi tényezők, amelyeknek a dinamikája előzőleg a szakszervezetek lényeges növekedéséhez vezetett, a hetvenes évek közepétől fogva ellenkező irányban hatottak, és a szakszervezetek hatalmi és számbeli hanyatlását idézték elő, aminek következtében pedig a munkaadók és a munkavállalókat képviselő szakszervezetek közötti viszony is átalakult.

Az elmúlt két és fél évtized során a gazdasági rendszerben és az ipari munkaviszonyokban az alábbi változások negatív hatással voltak a kollektív munkaviszonyra és azon belül az arbitrálásra is:

- a vállalatvezetőség és a szakszervezetek közötti viszony polarizálódott;
- a szakszervezetek tagságának száma abszolút mértékben csökkent;
- a törvényhozás fokozottabban beavatkozott az alkalmazottak jogainak meghatározásába;
- az arbitrálási eljárás formálisabbá és jogszerűbbé vált;
- végezetül újrajta ügyek is felmerültek.

Míg a második világháborút követő három évtizedet a vállalatok és a szakszervezetek közötti viszonylagos harmónia és hatalmi egyensúly jellemezte, addig az 1970-es évek óta fellépő gazdasági változások kiélezték a két fél közötti



viszonyt, mivel a munkaadók fokozódó agresszív magatartása következtében a szakszervezetek védekező pozícióba kényszerültek.

Joggal merül fel a kérdés, hogy melyek voltak a gazdasági jelenségek, amelyek a két fél között fennálló erőviszonyokat döntően megváltoztatták. Ezek közül elsősorban a gazdasági tevékenység globalizálódását és a termelés technológiájában bekövetkezett radikális változást kell megemlítenem.

A globalizálódás az amerikai gazdaság számára azt jelentette, hogy a gyáripari alkalmazottak munkafeltételeit és az ezekből eredő életszínvonalat már nemcsak az amerikai munkaerőpiacon belül érvényesülő tényezők és trendek határozták meg, hanem például a dél-koreai vagy indonéziai munkaviszonyok is. Számos amerikai vállalat ugyanis leányvállalatokat létesített az ún. fejlődő dél-ázsiai országokban. Az ott dolgozó alkalmazottak bére és egyéb munkafeltételei azonban messze az amerikai színvonal alatt maradtak. Ezáltal mindig fennáll annak a veszélye, hogy ha a szakszervezetek nem paríroznak, a vállalatok az Egyesült Államokban még működő üzleteiket is áttelepítik valamelyik olcsó bérű ázsiai országba.

Ezek a fejlemények az amerikai szakszervezetekre katasztrofális hatást gyakoroltak. Nem voltak többé abban a hatalmi helyzetben, hogy a kollektív tárgyalások során tagjaik részére jelentős béremelést és egyéb kedvező feltételeket érjenek el. Ennek következtében az átlagos reálbér 1975 és 1995 között alig emelkedett, ami többek között a jövedelemelosztás polarításában is megnyilvánult.

Mint említettem, a másik tényező, amely a szakszervezetek és a vállalatvezetés között korábban fennálló erőviszonyokat a vállalatvezetés számára megváltoztatta, a termelés technológiájában bekövetkezett radikális változás volt. Az elmúlt harminc év folyamán a számítógépek, a robotok és a szerszámgépek automatizálása lényegesen megváltoztatta a termelés korábbi módszereit. A tömegtermelést az ún. magas teljesítményű rendszer váltotta fel, amely mindenekelőtt a minőségi termelést és a rugalmasabb munkabeosztást hangsúlyozza. Ez az új termelési modell a vállalatvezetés és az alkalmazottak szoros együttműködését igényli.

Az új helyzet lehetővé teszi, hogy az alkalmazottak részt vegyenek a menedzseri döntésekben, illetve előterjesszék a termelés technikájának megjavítását célzó javaslataikat. Ez a rendszer nemcsak maximálja az együttműködést, és minimalizálja a konfliktus lehetőségét,<sup>17</sup> hanem elhalványítja az ún. fehér galléros és kék galléros alkalmazottak között korábban meglévő választóvonalat.

17 Marshall: 49th Proc., N44, 1996. 305.



Mindezek a fejlemények részben csökkentették a szakszervezetek vonzerejét, részben pedig összeszűkítették tradicionális szervezési területeit. Korábbi sikereiket a szakszervezetek részben annak köszönheték, hogy éles választóvonal mutatkozott a fehér galléros és kék galléros alkalmazottak között. Az előbbiek több kedvezményt élveztek, például nem kellett blokkolniuk a munka megkezdésekor és befejezésekor. Közelebb álltak a vállalatvezetéshez, tisztább munkahelyük volt. Ezért a szakszervezeteknek mindig nehezebb dolguk volt a fehér gallérosok beszervezésével. Most, hogy az új termelési rendszerben a demarkációs vonal az alkalmazottak eme két csoportja között eltűnőben látszik, a szakszervezeteknek a kék gallérosokra gyakorolt vonzereje is csökkent.

A termelési technikában bekövetkezett forradalmi változások a szakszervezeteket negatívan érintették. Az új technológia a régi tömegtermelési módszert elavulttá tette. Márpedig a tömegtermelési iparágakban foglalkoztatott munkaerő szolgált a szakszervezetek szervezési bázisául. A szakszervezetek lehangolásának mértékét a szervezett munkásoknak a nemzeti munkaerőben elfoglalt aránya példázza. Amíg 1950 körül a szakszervezetek a munkaerő 36%-át képviselték, addig 1995-re ez az arány körülbelül 11%-ra csökkent.

A szervezett szektornak abszolút és arányos csökkenése az arbitráls intézményére is károsan hatott. Az 1990-es évtized legelejéig az arbitráls majdnem kizárólag a kollektív szerződések megsértéséből eredő viták eldöntésével foglalkozott. A szakszervezetek bázisának összezsugorodásával párhuzamosan a szervezett szektorban fellépő viták száma is abszolút mértékben csökkent, azaz egyre kevesebb ügy került arbitrálsra. De a szervezett munkaerő számának csökkenésén kívül még az a körülmény is befolyásolta az arbitrálsok számát, hogy a vállalatvezetés és a szakszervezetek közötti erőviszonyok eltolódása folytán a szakszervezetek ha vonakodva is, de számos olyan esetben is kiegyeztek, amelyeket azelőtt arbitrálsra terjesztettek elő. A tagdíjakból eredő jövedelem csökkenése és az arbitráls költségeinek emelkedése is arra szorította a szakszervezeteket, hogy csak kivételes esetekben forduljanak arbitrálsához.

A kollektív munkaviszonyban az előbb tárgyalt kedvezőtlen változások az arbitrátorok tradicionális szerepét is módosították, és azokat nehéz választás elé állították. El kellett döntenük, hogy továbbra is a kollektív munkaviszonyra korlátozzák-e működésüket, és ebben az esetben elfogadják azt, hogy a szakszervezetek hanyatlásával tevékenységük is erősen csökkenni fog, vagy pedig korábbi elveik feladásával elvállalnak olyan ügyeket is, amelyek nem a szervezett szektorokban keletkeznek.<sup>18</sup> Döntésüket az is elősegítette, hogy az utóbbi

18 Zack: 48th Proc., NAA, 1995. 4.



években számos vállalat, részben azért, hogy a szakszervezeteket kívül tartsa, részben pedig azért, hogy alkalmazottjainak a morálját növelje, elfogadta az arbitrációnak egy módosított formáját. Ezeknél a vállalatoknál ha egy alkalmazott úgy érzi, hogy a vállalati szabályokban biztosított jogait a munkaadó megsértette, akkor arbitrációra viheti panaszát. Eben az eljárásban a panaszosnak különböző lehetőségei vannak érdekeinek védelmére. A tárgyalásokon képviselheti saját magát, felkérhet egy másik alkalmazottat, hogy legyen szószólója, vagy felfogadhat egy ügyvédet.

Annak érdekében, hogy ezek az ügyek is méltányosak legyenek, és pártatlan elbírálásban legyen részük, a Szövetségi Közvetítő Bizottság, valamint az Arbitrátorok Nemzeti Akadémiája szabályokat hozott, amelyeknek a vállalat részéről való elfogadása lehetővé teszi azt, hogy elismert semleges arbitrátorok is elvállalják az ilyen természetű ügyek tárgyalását. Vagyis a szakszervezetek hanyatlása és a szervezetlen vállalatok terjedése döntő változásokat hozott az arbitrátorok tradicionális szerepében és működési területében.<sup>19</sup>

Végezetül új vitás ügyek felmerülése és a korábbi ügyek elbírálásában bekövetkezett változások is hatással voltak az arbitrációs funkcióra. Az új vitás ügyek elsősorban az ún. fehér galléros alkalmazottak a közelmúltban létrejött szervezeti képviselőinek tulajdoníthatók. Témák, úgymint egy tisztviselő munkájának kiértékelése vagy továbbképzési kötelezettsége, nem jöttek szóba, amikor a kollektív munkaviszony főleg a kék galléros alkalmazottakra vonatkozott. A régebbi ügyek elbírálásában bekövetkezett változást pedig a következő példával illusztrálhatom. Negyven évvel ezelőtt egy alkalmazottat, ha rajtakapták azon, hogy a munkahelyén elaludt, akkor azonnali hatállyal elbocsátották. Ugyanakkor az a munkavállaló, akit azzal vádoltak, hogy az egyik kolléganőjét molesztálta, csupán néhány napos felfüggesztéssel megúszta. Ha manapság ugyanez a két ügy kerülne elbírálásra, kimenetelük egészen más lenne. Azt az alkalmazottat, aki elszunyókált a munkahelyén, valószínűleg csak két-három napra függesztenék fel. Viszont, aki kolléganőjét molesztálta, már az első esetben elbocsátának, hacsak enyhítő körülmények nem szólnának az alkalmazott javára. A fenti kihágások megítélésében bekövetkezett változások a társadalom értékrendszerének módosulását tükrözik vissza.<sup>20</sup>

Az arbitrációs eljárások formálisabbá és jogszerűbbé válása is hatással volt az arbitrátorok működésére.

A hetvenes évek közepéig az arbitrációs eljárást nagyfokú informalitás jellemezte. A tárgyalásról nem vettek fel szó szerinti jegyzőkönyvet, a feleket laikus

<sup>19</sup> Weatheril: 49th Proc., NAA, 1996. 6.

<sup>20</sup> Mittenthal: 50th Procl., NAA, 1997. 3–4.



személyek, úgymint a személyzeti osztály egy tagja és egy szakszervezeti megbízott, képviselték. A tárgyalás befejeztével a felek záró vitairatot nem terjesztettek be. Mindezek következtében az arbitrálsra kerülő ügyek gyorsan és kevés költséggel intéződtek el. Az utolsó két és fél évtizedben ezt az informális fokozatosan növekvő formalitás váltotta fel. Manapság az arbitrálsai tárgyalások inkább egy törvényszéki eljáráshoz hasonlítanak. A feleket egyre gyakrabban ügyvédek képviselik, akik az időt igénylő, jogszerű eljárásokat részesítik előnyben. A tárgyalásról gyorsírással jegyzőkönyvet vesznek fel, és annak befejeztével a feleket képviselő ügyvédek rendszerint záró vitairatok beterjesztéséhez ragaszkodnak. Ezek következtében a tárgyalások és a döntések meghozatalának az időtartama meghosszabbodott, és ugyanakkor az ügyek elintézése költségesebbé vált. Ezeknek a fejleményeknek a mellékhatásaként a szakszervezetek kevesebb ügyet képesek arbitrálsra terjesztetni, mert a megnövekedett költségeket az amúgy is csökkenő bevételeikből nehezebben tudják előteremteni.

Az arbitráls növekvő formalizálódását részben a törvényhozás által hozott új alkalmazotti jogok is előmozdították. 1964-től ugyanis a törvényhozás olyan új jogokat kodifikált az alkalmazottak javára, amelyek azelőtt nem léteztek, vagy amelyeket a kollektív szerződésben biztosítottak. A női nem vagy a feketék elleni diszkriminálás eltiltása példázza az új törvényes jogokat.

A munkavállalók különleges jogainak megállapítása terén a törvényhozás fokozódó beavatkozása a kollektív szerződés és az arbitrátori eljárás korábbi hegemoniáját csökkentették.<sup>21</sup> Számos ügy, amit korábban a vállalaton belüli panaszeljárásban és végső fokon arbitráls során intéztek el, most a bíróságok elé kerül. Emellett a vállalatok egy része, hogy a bírósági eljárást elkerüljék, az alkalmazotti jogokat védő törvények idevonatkozó rendelkezéseit belefoglalta a kollektív szerződésbe. Ezért az arbitrátornak diszkriminációs vagy a nemi molesztálásra vonatkozó ügyek elbírálásakor nemcsak a kollektív szerződés megfelelő rendelkezéseit, hanem a vonatkozó törvényeket is értelmeznie kell.<sup>22</sup>

Mindezen túl a kollektív szerződés és az alkalmazottak jogait biztosító törvények párhuzamossága a bíróságoknak több alkalmat ad arra, hogy az arbitrátori döntéseket felülvizsgálják. Ez viszont sok esetben az eljárások megduplázásával jár, amely a végleges jogorvoslás időpontját elhalasztja, és ugyanakkor a vita elintézésével járó költségeket növeli.

21 Weatheril: i. m. 3–4.

22 Zack: i. m. 2.



Az alkalmazottak jogainak kodifikálásával és a bíróságok hatáskörének kiterjesztésével párhuzamosan az arbitrálás szerepe és fontossága a munkaügyi viták elintézésének terén csökkent. Ebből az a konklúzió vonható le, hogy az arbitrátor és az állami szervek hatáskörei között fordított (inverz) viszony áll fenn. Érdekes módon az amerikai arbitrálás és a kormánysszervek viszonya éppen ellenkező irányba mozog, mint az európai országokban, ahol az államnak a munkaviszonyok feletti kontrollja a múltban majdnem 100%-os volt, és csak az utóbbi években mutatkozik tendencia az ipari munkaviszony és azon belül a kollektív munkaviszony további tanulmányozására, annak megállapítására, hogy az állami törvényhozás és a felek által adminisztrált vitaelintézés terén történő fejlemények előmozdítják-e vagy hátráltatják az ipari békét.

### Az arbitrátorok értékrendszerének döntéseiket befolyásoló hatása

Az általános feltevés szerint az arbitrátorok pártatlanul, elfogulatlanul, saját ideológiájuktól és érzéseiktől függetlenül hozzák meg döntéseiket. Maguk az arbitrátorok is meg vannak győződve arról, hogy értékrendszerük döntéseiket nem befolyásolják. Ha nehezen is jutnak el egy elhatározásra, elkerülik azt, hogy értékrendszerük végső döntésükre kihatással legyen. Az arbitrátorok a bíróhoz hasonlóan úgy ítélik meg szerepüket, hogy az hűvösen objektív és személytelen. A kérdés az: vajon a valóságban is úgy van-e, hogy amikor egy vitát eldöntenek, képesek-e arra, hogy teljesen függetleníteni tudják magukat értékrendszerüktől, ideológiájuktól?

Ez a kérdés sokáig elkerülte az ipari munkaviszony kutatóinak a figyelmét. Az utóbbi időben azonban az Arbitrátorok Nemzeti Akadémiájának keretén belül egyre több elismert arbitrátor felvetette annak a szükségességét, hogy az arbitrátorok értékrendszerével és annak döntéseikre való hatásával módszeresen foglalkozzanak. Hivatkozás történt Cardozónak, a híres amerikai jogtudósnak a megállapítására, amely szerint a bíróságok gazdasági és társadalmi ügyekben hozott ítéletei bizonyos mértékben visszatükrözik a bírók gazdasági és társadalmi filozófiáját. Ha ez a bírók esetében igaz, akkor az arbitrátorok esetében, akik kvázi bírói tevékenységet fejtenek ki, hasonló konklúzió nehezen kerülhető el.<sup>23</sup>

Az előzetes kutatások, amelyeket James Gross, a Cornell University tanára kezdeményezett, arra mutattak rá, hogy az arbitrátorok döntésekben elismerik a szabad piac szükségességét és a termelékenység előmozdításának fontosságát.

<sup>23</sup> Cardozo: *The Nature of the Judicial Process*. Yale Univ. Press, 1921. 167.



Ezért amikor az arbitráálás folyamán ezek a kérdések felmerülnek, az arbitrátorok támogatni fogják a munkaadók ezeket a célokat előmozdító akcióit, hacsak a kollektív szerződés kifejezetten nem intézkedik másképpen. A szabad piac és a termelékenység elveinek a támogatása az arbitrátoroknak azon az értékítéletén alapszik, hogy a szabad verseny a társadalomnak több hasznot hoz, mint amennyi kárt okoz. Ugyanígy azok a vállalatvezetői politikák, amelyek a termelékenységet mozdítják elő, a társadalom érdekét szolgálják.<sup>24</sup>

Az előbb felvázolt arbitrátori értékrendszer olyan konkrét esetekben is megnyilvánul, amikor bizonyos vezetői utasítás teljesítését az egyes munkavállalók megtagadják, arra való hivatkozással, hogy az az egészségüket és testi épségüket veszélyeztetné. Mittenenthal, az MIT tanára és jól ismert arbitrátor rámutatott azokra a helyzetekre, amelyekben az arbitrátoroknak lehetősége nyílik arra, hogy értékrendszerét érvényesítse. Bár kötelezve vannak arra, hogy a kollektív szerződés rendelkezéseihez tartsák magukat, az arbitrátoroknak mégis sok esetben mozgási tere van abban a vonatkozásban, hogy a szerződés melyik rendelkezését alkalmazza az eléje terjesztett ügyre. Ezen keresztül pedig lehetőség nyílik arra, hogy az arbitrátor értékrendszere többé-kevésbé érvényesülhessen.<sup>25</sup>

A fegyelmi ügyek egy másik területet képeznek, ahol az arbitrátoroknak alkalma van aszerint dönteni, hogy ő mit tart helyesnek vagy kívánnivalónak. Az arbitrátor fogja eldönteni, hogy milyen súlyosnak látja az alkalmazott szabálysértését, vagy hogy a vállalat által kiszabott büntetés arányban áll-e az elkövetett kihágással. Az arbitrátoroknak ugyancsak lehetősége nyílik értékelve érvényesítésére akkor, amikor a tanúk szavahihetőségét és a beterveztett bizonyítékok súlyát értékeli.<sup>26</sup>

Ezek a példák csak azt szemléltetik, hogy milyen helyzetekben van lehetőség arra, hogy az arbitrátor döntésében értékrendszerét érvényesítse. Arra a kérdésre, hogy a saját értékrendszer alkalmazása milyen gyakran és milyen mértékben történik, kutatási adatok hiányában nehéz lenne feleletet adni. Annak a ténynek, hogy az arbitrátorok értékrendszerével foglalkozó kutatások még gyerekcipőben járnak, elsősorban az a magyarázata, hogy az arbitrátorok meg vannak győződve arról, hogy döntéseik meghozásában saját értékrendszerük nem játszik komoly szerepet, azaz az ügy tényei és a kollektív szerződés rendelkezései alapján döntenek, vagyis nem azon az alapon, hogy ők személy szerint mit is tartanak igazságosnak.

24 Gross, Greenfield: *Arbitral Value Judgements in Health and Safety Disputes*. 34 *Buffalo Law Review*, 645 (1985).

25 Mittenenthal: i. m. 231.

26 Gross: 50th Proc., N44, 1997. 219.



Rá kell mutatnom egyben arra is, hogy az arbitrátor objektivitásra való törekvésén kívül az arbitrációs rendszerbe beépített biztosítékok is hozzájárulnak ahhoz, hogy az arbitrátor tudatosan minimalizálja döntéseiben saját értékrendszerének szerepét. Miután a felek általában ad hoc alapon nevezik ki az arbitrátorát, ha egy arbitrátor következetesen vagy a vállalat, vagy a szakszervezet javára dönt, az a fél, amelyet döntéseivel hátrányos helyzetbe hoz, legközelebb meg fogja vétózni a szóban forgó arbitrátor választását. Ezért van az, hogy a felek, mielőtt egy arbitrátorát kiválasztanak, szorgalmasan tanulmányozzák annak publikált döntéseit. Továbbá az arbitrátorát az a körülmény is objektivitásra készíti, hogy mielőtt valakit az FMCS vagy az Amerikai Arbitrátorok Társasága a listájára tesz, annak a vállalatokkal, illetve a szakszervezetekkel minden kapcsolatot meg kell szakítania.

E rövid áttekintés után egyértelmű az, hogy az arbitrátorok döntési folyamata és az abban érvényesülő tényezők és hatások további vizsgálatra szorulnak. Az ezen a téren folytatandó kutatásnak meg kell állapítania az arbitrátori értékrendszernek az ügyek elbírálásában játszott szerepét. Csak e kutatások eredményeképpen lehetséges az arbitrátoroktól elvárni azt, hogy döntési folyamatukban a szubjektív elemeket felismerjék, és azoknak a hatásait minimalizálják.

Végezetül megint szeretném reményemet kifejezni, hogy bár előadásom elsősorban az amerikai kutatási eredményekre és tapasztalatokra támaszkodott, az itt alkalmazott koncepciók keret és az itt használt módszerek – bizonyos módosításokkal – más országokban, így Magyarországon is alkalmazhatóak lesznek.





Ferge Zsuzsa

az MTA levelező tagja

# A CIVILIZÁCIÓS FOLYAMAT FENYEGETETTSÉGE

Elhangzott 1998. december 9-én

**K**orunk egyik legnagyobb közvitája akörül zajlik, hogy mekkora és milyen államra van szükség. A vita sosem volt – valószínűleg nem is lehet – mentes érdekektől és ideológiai felhangoktól. Ezért egy ideje úgy gondolom, hogy azt a 200–300 éves, talán hosszabb történelmi folyamatot kellene átlátunk, amelynek során a „modern” állam mai formája és funkciórendszere kialakult. A történelem nem nyújt védelmet ideologikus értelmezésekkel szemben, de új oldalról világíthat meg egyértelműnek vélt kérdéseket.

Hadd jegyezzem meg mintegy zárójelben, hogy nem először menekülök a történelemhez annak érdekében, hogy valamivel jobban megértsem a jelent. Ezzel kísérleteztem például akkor is, amikor közel 15 évvel ezelőtt az éppen akkor föléledő szegénypolitikai szemlélet érvényességét és korlátait 100 év tapasztalatai alapján igyekeztem értelmezni. Akkor is mentegetődztem azért, hogy illetéktelenül használom egy másik tudományág eszközeit. Max Weberet hívtam felmentő tanúnak, aki a következőket írta (*A tudomány mint hivatás*ban):

„Minden munka, amely szomszédos területekre nyúlik át – alkalmilag sor kerül erre, a szociológiában pedig kikerülhetetlen – maga után vonja azt a rezignált felismerést, hogy (rendelkezésre bocsátjuk ugyan azokat a szakember szempontjából hasznos kérdésfeltevéseket, amelyekbe ő a maga szakszemponthoz nem egykönnyen botlik bele, de) saját munkáknak elkerülhetetlenül rendkívül tökéletlennek kell maradnia.”

Most is úgy gondolom, hogy az állam és civilizáció viszonyának történelmi értelmezése nélkül nem tudunk a mában eligazodni, de azt is tudom, hogy én csak néhány követ tudok hozzáadni ehhez a gigantikus épülethez.

Ebben az előadásban elsősorban magának a civilizációs folyamatnak a megértésére koncentrálok. E vizsgálódásból adódnak bizonyos következtetések az állam szerepére nézve, amelyeket vagy másutt megírtam (Ferge, 1997), vagy reményem szerint majd másutt megírok. Itt csak a civilizáció és állam közti leglényegesebbnek vélt összefüggéseket foglalom össze.

## Mi értendő civilizáción?

### *„Klasszikus” közelítések*

A civilizáció tartalma gazdag, értelmezéseinek száma majdhogynem végtelen, tehát valamilyen kiindulópontot a magam számára rögzítenem kellett. A történelmi irodalom óriási, a szociológiai szegényesebb. Nekem az utóbbira is szükségem van. Ezért a kályha, amelytől elindultam, Norbert Eliasnak és követőinek, első rendben Abram de Swaannak a munkássága. E civilizáció-felfogás csak Nyugat-Európára és csak az utolsó néhány száz évre koncentrál. E civilizációs folyamatok a kapitalizmus kibontakozásával, a technikai modernizálódással, az urbanizálódással, a politika átalakulásával párhuzamosan formálták a társadalmi viszonyokat és magatartásokat.

Lényegében ezt a kort dokumentálja izgalmas részletességgel Braudel nagy műve (1985), az utolsó néhány évszázad mindennapi életében bekövetkezett változások nagy ívű tablója. A mű alapanyaga az anyagi kultúra, ahogyan azt az egymás mellett élő, sosem egészen független civilizációk az időben alakítják. E keretben együvé szervülnek az átfogó demográfiai vagy termelési folyamatok, az, hogy mikor, milyen technikával mit termeltek, hogyan szállítottak és cseréltek, hogyan terjedtek civilizációk között eljárások, növényfajták, szokások, valamint a mindennapok életmódmorzsái. Látjuk, hogy ki mikor evett kásás pépet vagy fehér kenyeret, aludt szalmán vagy baldachinos ágyban, evett kézzel vagy ezüstkanállal, kinek mikor lépett be az életébe az éjjeliedény, ki mit használt gyógyszernek, és mitől undorodott, milyen hitek kötődtek a húshoz vagy sajtához Dél-Európában vagy Kínában, hogyan fogadta el Európa a törököktől a kávé, és alakította ki a kávéházat. Az ezer és ezer apróságból, a „történelem apró porszemecskéiből” állnak össze tartós láncok, szabályszerűségek. Braudel főként a *materiális kultúrával*, s az ehhez kapcsolódó szokásokkal foglalkozik, hangsúlyozva, hogy épp azon szabályszerűségeket helyezte „előtérbe, amelyek a civilizációk és kultúrák körébe tartoznak... mert ezek összekötő kapcsokat,



vagyis rendet teremtenek... egymástól szinte idegen tények között, kezdve azokon, amelyek a spiritualitás és értelem körébe tartoznak, egészen a mindennapi élet tárgyaiig és eszközeiig”.<sup>1</sup>

Elias munkássága átfogja a *materiális kultúra és szokások, a társas és társadalmi viszonyok és kommunikáció, a mentális funkciók, az érzelmi háztartás és a személyiségvonások átalakulásának* számos vonulatát (Elias, 1987). Alapvetően azt a folyamatot kíséri végig, ahogy az „udvarban”, vagy onnan kiindulva fokozatosan finomult minden a legegységesebb életfunkcióktól – mint amilyen az orrfűvés, az étkezés, a szexuális viselkedés – a társas együttlét „udvariasként”, civilizáltként elfogadott érintkezési normáiig, a bonyolult mentális funkciókig, majd az érzelmi háztartásig. A vizsgált korszak második felétől erősödik fel az individualizálódás gyakorta elemzett folyamata. Ezt kísérte a privát szféra és az ehhez tartozó intézmények átalakulása, a nukleáris család mind szorosabb és érzelmi közösséggé válása, az „otthon” és általában a privát tér, a „privacy” fontosságának növekedése (Ariès, 1973).

Swaan a civilizációs mozzanatok között tartja számon azt, ahogyan a változó feltételek következményeként csökkennek a nemek, generációk, feljebb- és alattvalók, főnökök és beosztottak, kormányok és alattvalók közötti társadalmi távolságok, a megszólítások és érintkezési formák módosulását hozva magukkal. Az egyenlőbb individuumok közötti viszonyok okként és okozatként azzal járnak, hogy az érzelmi háztartás menedzselésében, illetve az egymás közötti viszonyokban a parancsot a tárgyalásos megegyezés váltja fel (Swaan, 1990:150–167).

Mindezt természetesen aládúcolják a polgári társadalom új intézményei és ezek értékei, normái, a szabad piaci szerződéstől a modern politikai demokrácia mintáiig, az egyéni jogok bővüléséig és erősödéséig, mindenki egyenlő emberi méltóságának elismeréséig.

Elias és követőinek elmélete szerint egy sor, generációkon át tanult magatartás vagy beállítódás beépül a személyiségbe (természetesen nem biogenetikus öröklésről, hanem „szociogenetikus” és „pszichogenetikus” folyamatokról van szó). Kialakul „egy komplexebb és a korábbinál biztonságosabban működő »felettes én« háztartás” (Elias, 1982:248), amely a külső kényszereket belső kényszerekkel váltja fel. Ezzel a magatartások egy része kevesebb energiát

<sup>1</sup> Szép feladat lenne összevetni a történész Braudel és az inkább szociológus Elias forrásait. Mindkét esetben óriási a feldolgozott anyag, bár Braudelé, már csak a szélesebb téma miatt is, gazdagabbnak tűnik. Nem szisztematikus benyomásaim alapján még a hasonló témák esetében is a várhatónál sokkal kevesebb az azonos forrás, s a közös forrásokon más a hangsúly (például Erasmus 1530-ban napvilágot látott, ifjakat nevelő illetéktankönyvének Eliásnál központi, Braudelnél marginális szerepe van). Elias késői sikerére utal, hogy Braudel az eredetileg 1979-ben megjelent munkában nem hivatkozik rá, azaz feltehetően nem ismerte az 1939-ben kiadott, de sokáig csak angolul lappangó művet.



igénylő automatizmusává válik (Elias, 1987:680)<sup>2</sup>. A civilizáltnak tekintett személyiségvonásokból Elias leggyakrabban az önkontrollt, bizonyos összefüggésekben az önmegegyezéses magatartást, a kifinomultabb modort, a másokra és a tabukra való nagyobb odafigyelést, a nagyobb rendezettség iránti igényt, a körültekintőbb, előrelátóbb magatartást emeli ki (Elias és Scotson, 1994:15), illetve azt, hogy a hirtelen késztetéseket (impulzusokat) egy belsővé váló, hosszabb távú előrelátás követelményeinek vetik alá (Elias, 1987:703). A folyamat gyakorta említett magva, talán legfontosabb következménye a mindennapi élet pacifikálása. Ennek személyi feltétele nyilvánvalóan az önkontroll, külső eszköze pedig az, hogy az erőszak eszközeit az állam jórészt monopolizálja. Ez a fejlemény megszabadította az embert attól a szorongástól, hogy bármely sarkon személyes fizikai támadás érheti, s attól a kényszertől, hogy állandóan ellentámadásra készen álljon (bár nem kevés új szorongás léphetett a régiek helyébe).

Ezt a futólag áttekintett civilizációs „leltárat” szeretném néhány meggondolással kiegészíteni, vállalva azt a kockázatot, hogy Elias vagy De Swaan nem értene teljesen egyet értelmezéseimmel.

### *További meggondolások a civilizációs folyamat társadalmi feltételeiről és tartalmáról*

1. Elias (továbbá De Swaan és talán legeggyértelműbben Braudel) egész gondolatrendszeréből azt tartom a legfontosabbnak, hogy a civilizáció a társadalmi együttélésről szól, arról, hogy miként tudhatunk egymással és egymás mellett élni egy adott társadalomban. Ebből a nézetből természetesen minden valaminnyire is tartós társadalom kidolgozott egy civilizációt<sup>3</sup> – magatartási, érint-

2 Elias és Swaan egyaránt világossá teszik, hogy a civilizáció önkontrollt növelő hatásának gondolata természetesen Freudra épül. A szuper-ego nemcsak az egyénhez kötődő jelenség, hanem egyike az egyént a társadalomhoz kapcsoló láncszemeknek. Freud expliciten állítja, hogy a civilizáció ára az egyéni szabadság valamilyen mértékű korlátozása: „Az egyén szabadsága nem a civilizáció hozadéka. A civilizáció előtti világban sokkal nagyobb volt, jöllehet értéke abban az időben csekély volt, mert az egyén nem volt abban a helyzetben, hogy megvédelmezhesse. A szabadság a civilizáció fejlődésével fokozatosan korlátozódott, s az igazságosság azt követeli, hogy e korlátok mindenkire vonatkozzanak.” (Freud, 1951, 59–60; magyarul némileg másként: Freud, 1982:359.)

3 Hadd mellőzzem a civilizáció, kultúra, modernizáció fogalmak pontos definícióját. A legtudományosabb irodalomban is teljes a káosz e tekintetben, s a legnagyobb enciklopédiák gyakran keresztbe (szinte idem per idem) definiálnak. A nagy *New Encyclopaedia Britannica*, Macropaidea 1983-as kiadásában például a következő olvasható: „with the advance of modernisation [...], at any rate the outcome will be a new world of civilization, heir to Western and non-Western cultures alike”. Mellesleg Freud hivatkozott művének címe németül *Das Unbehagen in der Kultur*, angolul *Civilization and its discontents*, magyarul Rossz közérzet a kultúrában. Braudel, miután világméretben tekintette át kultúrák és civilizációk küzdelmét, azt írja, hogy: „Kultúrának olyan civilizációt nevezünk, amely még nem érte el érettségét, optimumát, és nem biztosította fejlődését.” (Braudel, 1985:98).



kezési és erkölcsi szabályokkal, s ezek kikényszerítését segítő eszközökkel.<sup>4</sup> Ezek mind részévé válnak a társadalom önmagáról alkotott képének. Az adott társadalmon belül identitást formálnak és összeköthetnek, egyben pedig a „másként civilizáltakkal”, a „barbárokkal” szembe is fordítanak. Ebben a közelítésben nehezen értelmezhető művelet civilizációkat értékelő céllal összehasonlítani. Nemigen található olyan mértékrendszer, amelynek alapján azt állíthatnánk, hogy a perui, a kínai vagy az európai civilizációk közül az egyik a másiknál jobb vagy épp fejlettebb.

2. Sok általam ismert munka foglalkozik egyes civilizációk közötti „transzferekkel”, de kevés szisztematikus elemzést találtam a civilizációs folyamat terjedésének egy adott társadalmon *belüli feltételeiről*. Elias első renden az „udvarban”, a társadalom legfelső rétegében kialakuló értékeket, kódokat és normákat vizsgálja. Műve olvastán azt a benyomást szerzi az ember, hogy ami fent kialakul, az azután általánosul, mintegy spontánul elterjed, hogy végül az egész társadalom önképének részévé váljon. A spontán „lecsurgásra” vonatkozó feltevést, ami jelenthet adaptálást, utánzást, szociális tanulást, kérdésesnek tartom. Braudel többet foglalkozik mind az alsó osztályok és szegények sajátos helyzetével, mind a különböző tárgyak és szokások térbeli, néha társadalmi terjedésével, de egyelőre e részletekből sem bontakozik ki számomra valamilyen szociológiailag értelmezhető szabályrendszer arról, hogy az egyes civilizációs elemek miként mozognak, terjednek.

A hierarchikusan szervezett társadalmakban „fent” kialakuló szokásokat, normákat, habitusokat szükségképpen a társadalom csúcsára jellemző körülmények és kihívások kondicionálták. Ezek a társadalom többi rétegében igen eltérőek lehettek, s ez befolyásolja a transzfereket.

*Ha a csúcstól távol lévők nincsenek anyagilag és szellemileg felkészülve az új habitusok befogadására, ez a transzfereket lehetetlenné teszi.* Triviális példával élve: ha a „civilizált” viselkedéshez hozzátartozik, hogy az étkezésnél kést és villát használjunk (legkorábban a 18. század óta – XIV. Lajos még megtiltotta vendégeinek a villa használatát<sup>5</sup>), akkor a társadalom minden tagjának képesnek kell lennie arra, hogy ezeket az eszközöket megszerezze – megvegye vagy elkészítse. S ami talán még fontosabb, elevennek kell lennie annak a belső meggyőződésnek, hogy a kés és villa használata mintegy természetes szükséglet. Ha tehát valaki nem használja ezeket az eszközöket, akkor bekerül a kevésbé civilizáltak, végső

<sup>4</sup> Ilyen általánosságai szinten nézve (egy) „civilizáció akkor válik lehetségessé, amikor egy szilárd mezőgazdaság és technológia alapján gazdasági többlet keletkezik, amely lehetővé teszi városok és írásos kultúra létrejöttét” (*New Encyclopaedia Britannica*, vol. 23). Braudel viszont épp a városok létrejöttében látja a különbséget civilizáció és kultúra között (Braudel, 1987:48–49).

<sup>5</sup> Braudel, 1985:210.



fokon a barbárok közé, akik voltaképp már nem is tartoznak az adott társadalomhoz.

Kissé másként fogalmazva: *ha a körülmények nem eléggé hasonlóak fent és lent ahhoz, hogy hasonló követelményeket támasszanak, és hasonló habitusokat tegyenek racionálissá, akkor vagy egyáltalán nem működnek a transzferek, vagy csak torzult átvétel lehetséges.* Bourdieu-nek valószínűleg igaza van abban, hogy a habitus a gyakorlat logikája, a gyakorlati érzék (*sense pratique*) maga, illetve ahhoz kötődik. Olyan gyakorlatok válhatnak belsővé és általánossá, vagyis habitussá, amelyek az adott körülményekből fakadó követelményekkel összhangban vannak (Bourdieu, 1972). A habitus akkor tud „megfelelően” működni, ha a társadalmi aktor „rendelkezik a gazdasági és kulturális tőke azon minimumával, amely ahhoz szükséges, hogy felismerje és megértse” egy adott helyzet követelményeit (Bourdieu és Wasquant, 1992:124).

Egyetlen illusztrációként hadd említsem Benda Kálmán tanulmányát az írástudás terjedéséről. Egy Mária Terézia által elrendelt felmérés felhasználásával Benda megállapítja, hogy a 18. század végén – jóllehet az iskolák sok helyütt működtek – a köznép, illetve a parasztság csak a földrajzi elhelyezkedése függvényében vált funkcionális írástudóvá, azaz ha közlekedési utak mentén élt, ha bekapcsolódott az árutermelésbe, ha adott és vett a piacon. A Nyugat és a Duna mente elég jól állt. De, kérdi Benda, Somogyban, Tolnában „a paraszt mire is használta volna hagyományos életformájában az írást-olvasást”? (Benda, 1978:298). Vagyis hát ez a gyakorlat nem vált habitussá, civilizációs elemmé ott, ahol irracionális volt az ilyenfajta energiabefektetés.

A feltételek hiánya vagy mássága miatt számos civilizációs modell jelentős átalakulásokon – egyszerűsödésen, torzuláson – megy át a diffúzió során. Ez az utóbbi kimenet távolról sem volt ellentétes a felső osztályok kvázi-intencionált szándékával. Az így kialakuló megkülönböztetések úgy segítették elő a kommunikációt, a közönség felismerhető civilizáció lehetőségét, hogy közben fenntartották a társadalmi „felsőbbrendűség” tudatát biztosító szignifikáns megkülönböztetéseket.

3. A civilizációs folyamat *iránya* első pillantásra egyértelműnek tűnik: a civilizációs elemek „fent” alakulnak ki, és onnan szivárognak vagy préselődnek lefelé. Valójában azonban gyakori az interaktív civilizációs munka, sőt, lehetnek lent felmerülő igények vagy „kultúrjavak”, amelyek felfelé terjednek, vagy amelyeket felfelé irányuló nyomással kell kikényszeríteni.

A felülről indulás tűnik dominánsnak. Az az Elias-idézet, amely az étkezési szokások elemzését követi, egyszerre utal a felül kialakuló mintákra, a spontán lecsurgásra, ennek presztízs-csökkentő következményére, a terjedés társadalmi térbeli korlátjára s a folyamat interaktív jellegére. „(A)z udvarban honos szoká-



sok, viselkedésmódok és divatok szakadatlanul áramlottak be a felső középrétegekbe, ahol utánózták, és az eltérő szociális helyzetnek megfelelően... megváltoztatták őket. Éppen ezáltal (azaz miután kissé leértékelődtek) szűntek meg bizonyos fokig a felső réteg megkülönböztetésének eszközei lenni... Fent mindez a viselkedés további finomítására ösztönzött...”

Szélesebb körű interakcióra is lehet példát találni, amikor a társadalom alsóbb rétegei is bevonódnak a folyamatba. Valószínűsíthető például, hogy egyes folyamatokat felülről (akár hatalmi erőszakkal) indítanak el, majd azok spontánul terjednek tovább, sőt, végül „alulról” követelik ki fenntartását és kiterjesztését. Példa lehet erre a pénzhasználat, amely a modern piaci társadalom alapja. Mégis, először jelentős volt a népi ellenállás a széles körű pénzhasználat ellen, hogy egy idő után a munkások kezdjenek küzdeni azért, hogy munkabérüket ne természetben fizessék (Heller, 1945), vagy a szegények azért, hogy ne természetben kapják a segílyt. Ismertebb és egyértelműbb példa a társadalombiztosítás története. A kiszámítható jövő, az ezt építő biztonságok a modern európai civilizáció tartozékai. Mégis, az ezt az igényt kiszélesíteni és lefelé terjesztetni óhajtó szándékok (mondjuk, Bismarck Németországában) fentről indultak el, s a munkások gyakran tiltakoztak az új intézmény ellen, amely jövőbeli biztonságuk ígéretével amúgy is alacsony bérüket az adott pillanatban kurtította (Rimlinger, 1974; Magyarországról: Petrák, 1978). A továbbiakban azonban ez a kollektív biztonság mindenkivel szemben megvédelmezendő vívmány lett. Némi hasonlóságot mutatnak ezzel a polgárjogi mozgalmak. A sokáig jogfosztottak számára csöppet sem magától értődő, hogy nekik is lehetnek jogaik. Ám ha mégis eléri őket ez az igény, roppant fontossá s további jogok követelésének eszközévé válhat. Valószínűleg nehezebb példát találni arra, hogy egy később általánossá váló civilizációs elem vagy igény „lent” alakuljon ki, úgy, hogy annak formálásában nemcsak a hatalom, hanem még az értelmiség, azaz a szimbolikus világ specialistája sem vesz részt. A társadalomban leszorultak gyakran nemcsak a megfelelő kifejezési eszközöktől, a „hang” továbbításának lehetőségétől, hanem még a megfosztottság tudatától is megfosztatnak.<sup>6</sup>

4. Ha a civilizáció lényege az, hogy közös normákkal, kommunikációval stb. lehessen egy társadalomban együtt élni, akkor a folyamatnak a *társadalom mind szélesebb rétegeit el kell érnie*. A különböző szerzők által vizsgált folyamatok többsége spontánul csak töredékesen érte el a társadalom egészét. Ezért amikor fontossá vált a társadalom egésze (amely periódus többnyire a nemzeti államok

6 Elias egy ritka „ellenpéldája” arról szól, hogy Nyugaton a társadalmi különbségek csökkenése során „az alsó réteg jellemzői valamennyi rétegben elterjednek. Ennek tünete, hogy a nyugati társadalom [...] dolgozó társadalommá vált; korábban a munka az alsó rétegeket jellemezte csak” (1987:705). A példa érvényessége számtalan módon vitatható.



kialakulásához kötődik), akkor mindenütt szükség volt *civilizációs ágensekre*. Az egyházaknak és iskoláknak köztudottan mindig jelentős civilizatorikus missziójuk volt normák, kódok, viselkedési minták terjesztésében. Tessedik Sámuel például hosszan sorolja, hogy mi mindent kellene az iskolákban tanítani, s többek között azt teszi szóvá, hogy mily kevés „történt eddig Magyarországon a falusi iskolabéli gyermekeknél a rend szerént való ételnek tanítása eránt” (Tessedik, 1979:124). A modernizálódó Európában egy sor új intézmény kapcsolódott be e folyamatba, a különböző egyesületektől, fraternitásoktól, szakszervezetektől (Kalb, 1997) a gyárakon át a reguláris hadseregig és rendőrségig. A történet végtelen, itt csak érinthető. Egyetlen korai példával szeretném megvilágítani e komplex folyamatot épp a termelés körül kialakuló civilizációs folyamat segítségével. Az első nagy paternalista kísérlet New Lanark volt, miután a 18. század legvégén Robert Owen vált a feltételeket alakító társtulajdonossá. Saját megoldandó feladatát ő maga így látta: „Abban az időben Skócia alsóbb osztályainál [...] megtalálhattuk egy társadalmi közösség szinte minden bűnét, és igen kevés erényét. A lopás és orgazdaság volt rendes foglalkozásuk, a részegesség szokásuk, a kétszínűség és csalás megszokott mezük, a polgári és vallási lázongás napi gyakorlatuk. Csak abban voltak egységesek, hogy munkaadóikkal egyértelműen és mindenben szembeszegültek.”<sup>7</sup>

Ezt a „csőcseléknek” látott embertömeget kellett tehát átgyúrni. Owen a munkaadó dolgát többek között abban látta, hogy az ifjakba beleültesse „a figyelem, gyorsaság és rendszeret szokásait”. Ama korban még kivételként, mindezt nem lelki terrorral vagy a munkafelügyelők fegyelmezési és büntető eszközeivel akarta elérni, de nem is az érintettek és szervezeteik révén, hanem mindenekelőtt filantrópiával, neveléssel és a körülmények változtatásával. Ezért vizsgálta, hogy „(m)elyek a legjobb megoldások, amelyek révén ezeknek az embereknek és családjuknak tisztas és gazdaságos hajlékot, táplálkozást, ruhát, szakmát, oktatást, munkát és vezetést lehet biztosítani?” (uo.) Ezeknek az elképzeléseknek volt az első kísérleti terepe New Lanark. Az új szervezési-vezetési módszerek révén a munkások maguk tudták napi teljesítményüket figyelemmel kísérni. Ahogy Owen végighaladt az üzemeken, „nem volt szükség sem verésre, sem durva szidalmakra... csak rá kellett nézmem a munkásra és a teljesítményjelző kockán a színre...”. Az önellenőrzés és teljesítmény szerinti bérezés egyszerre fegyelmeztek és ösztönöztek. Betegpénztár, uzsoraárak nélkül jó minőségű árukat forgalmazó üzlet, az alkoholizmus szankcionálása s mindenek fölött egy egészen új nevelési rendszer alakították a falu és gyár életét. Az új „iskolarendszer” 18 hónapostól 10–12 évesig fogadta a gyermekeket,

<sup>7</sup> Robert Owentől (1813) idézi Thompson, 1980:859.



liberális nevelési elvekkel, ének- és táncitanítással, természetszeretetre nevelő, a szabadban tartott foglalkozásokkal – s közben az anyák az üzemben munkát vállalhattak. 1816-ban nyitotta meg Owen „Jellemformáló Intézetét”, amely a szabadidő eltöltésének, az idősebbek továbbtanulásának színtere is lett.<sup>8</sup> Mindez a kényszer, az ösztönzés, a hosszú távban is gondolkodó, jellemformáló nevelés sajátos elegye. Egyszerre szolgálta a paternalista filantróp álmait és a gyáros gazdasági érdekét. Az én szempontomból jól értelmezhető olyan civilizációs erőfeszítésként, amely a felülről kiinduló és a felső osztály számára (is) hasznos morált és habitusokat kívánta az addig „barbárokba” beplántálni vagy azokat rájuk kényszeríteni – bizonyos feltételek alakításával.

5. *A civilizációs ágensek működése* végtelen változatosságú, s itt csak egy mozzanatot emelek ki: az erőszak kérdését. Sokféle erőszak van, mint a törvényes és nem törvényes fizikai kényszer, a gazdasági kényszer, a szimbolikus (pszichológiai ható) erőszak. Azt hiszem, épp a két vagy három Európa (Szűcs, 1983) közti különbségek megértésében érdemelne különös figyelmet, hogy mikor milyen volt a fizikai és a másfajta, első renden a szimbolikus erőszak szerepe a civilizatorikus elemeknek többséggel való elfogadtatásban vagy rájuk kényszerítésében. A kétféle erőszak többnyire egymásba játszik, vegytisztán nem elválaszthatók.<sup>9</sup> Mégis, a civilizációs erőfeszítésekben rejtőző relatív súlyuk koronként és intézményenként változott.

Számos civilizatorikus folyamatot a kíméletlen kényszer indított el – elég arra utalni, hogyan fogadtatta el Szent István a keresztény vallást a pogány magyarokkal. A szimbolikus tartalmak segítségével a fizikai kényszer (egyes lázongó periódusok kivételével, amikor a hitben kételkedőket vagy azt megtagadókat olykor a legkegyetlenebb módszerekkel vezették vissza a helyesnek vélt útra) lassan átadta a helyét a szimbolikus erőszaknak, amelynek erőszak jellege úgy halványult, ahogyan a normák belsővé váltak. A normalizálódás és pacifikálás folyamata azonban *több generációt igényelt*, és sosem volt visszafordíthatatlan.

A fizikai erőszaktól a szimbolikus erőszak felé való eltolódás folyamata valószínűleg két síkon, ha úgy tetszik, a *courte durée*-ben és a *longue durée*-ben is megfigyelhető. Egy-egy intézmény egy-egy adott „civilizációs ciklusán” belül, mondjuk, az iskolába vagy a katonasághoz bekerülők egy-egy adott csoportjánál a kemény eszközök lassan háttérbe szorulhatnak az engedelmeskedést

<sup>8</sup> New Lanark Conservation (1989), több helyről.

<sup>9</sup> Még a látszólag öncélú kegyetlen erőszaknak is lehet vagy van szimbolikus üzenete – a „többiek” megfélemlítése, egy magatartástól vagy meggyőződéstől való elrettentés stb. És a legszelídebb szimbolikus erőszak mögött is vannak végső, reális erőszak-szankciók: a legtoleránsabb iskola is előbb-utóbb eltávolítja a „nem odavaló” tanulót.



kikövetelő más eszközökkel szemben (jóllehet „végső” szankcióként azért megmaradnak), míg végül legalább egyes normák, magatartások második természetűvé válnak. Hosszabb történelmi távlatban „a civilizáció a *longue durée* maga”<sup>10</sup>, s legalábbis Európában nemcsak a szokások kifinomulása figyelhető meg. Mintha az utolsó évtizedekben egyre kevésbé fogadnák el a fizikai erőszak alkalmazását azokban az intézményekben is, amelyekben ezek használata sok évszázadon át legitim volt – például a gyerekek verése az iskolában, amely magától értődő nevelési eszközből lassan törvényileg tiltottá válik.<sup>11</sup> Jó lenne tudni, hogy ebben mi a szerepe „nagyobb érzékenységünknek”; annak a felismerésnek, hogy az erőszak hosszú távon nemigen lehet hatékony; vagy talán annak, hogy a szimbolikus erőszak, a „szelíd erőszak” olyannyira raffinált lett, hogy lassan még erőszak jellegét is sikerül elfelejtetnie, azt, hogy végső fokon valóban reális erőszakról van szó.

6. Az egész civilizációs folyamatnak mindezek után alapkérdése, *hogyan jönnek létre a civilizációhoz való adaptációt lehetővé tevő feltételek azoknál, akiknél nem adottak a gazdasági és kulturális tőke szükséges minimumai.*

A feltételek egy része a társadalmi változások automatikus melléktermékeként kialakulhat. Benda példáját folytatva, a kereskedelem és ipar terjedésével az írástudás mind többek számára vált racionális gyakorlattá. A szegényebb rétegek helyzetének javulásával (már a 19–20. században) széles körhöz eljutottak a felsőbb rétegekre jellemző fogyasztási szokások – például a fehér kenyér, amely soká elérhetetlen privilégium volt (Braudel, 1985).

Az automatizmus azonban nem mindig működik. Az induló források is, a képességek is minden ismert társadalomban egyenlőtlenül oszlanak el, s ha a dolgok a „maguk útján”, a társadalmi erőviszonyok mentén haladnak, a kimenetek sem lehetnek mások. Ezért elkerülhetetlen az a kérdés, hogy mi módon biztosíthatók a szükséges minimális források ahhoz, hogy egy-egy civilizációs ciklus „végén” közeledjenek a feltételek, és többek kapcsolódjanak be a jobban civilizáltak körébe.

Mint mondtam, nem tudom, hogy a civilizáció jó-e vagy rossz, s azt sem, hogy mennyit javít és mennyit ront rajtunk. Ám az valószínű, hogy egy adott társadalom uralkodó normáinak megfelelő „jobb civilizáltság” azt is jelenti, hogy az egyén jobban ismeri a játékszabályokat; jobban tud igazodni a társadalmi elvárásokhoz; jobban el tudja magát fogadtatni; az adott lehetőségeket jobban ki tudja használni; és a változó feltételekhez jobban tud alkalmazkodni. Ez

<sup>10</sup> Maurice Aymard előszavából, Braudel, 1987:17.

<sup>11</sup> Iskolakutatásaim miatt régóta érdekelt az iskolai büntetés. 1970 körül egy angol elemi iskola igazgatójától kérdeztem, mivel büntetik a gyerekeket. A világ legtermészetesebb hangján mondta: „Hát botozunk” (caning).



a fajta adaptálódás sem értelmezhető automatizmusként. Kivált gyors változások és csekély vagy nem jó tőkék esetén szakadék keletkezhet a feltételek és a habitusok változási sebessége között. Ilyen válság idején „a szubjektív és objektív struktúrák közötti rutinná vált alkalmazkodás brutálisan szétrombolódik” (Bourdieu, 1992:130). A ma itt hajléktalanná válók jelentős részénél ilyesmiről is szó van: sokaknak egyszerűen nincs lehetőségük sem arra, hogy jövedelmük gyors zuhanását más források mozgósításával ellentételezzék, sem arra, hogy a hirtelen és aránytalanul felszökő lakhatási költségeket valahogyan kezeljék. Nem tudnak lépést tartani a változásokkal. S amikor így kisodródnak a történelmi időből, ez egyben a társadalomból való kiszorulásukhoz vezet.

Ha mindez igaz, akkor legalább egy értékelés megengedett: könnyebb élni és túlélni egy adott társadalomban, ha az egyén vagy csoport jobban „civilizált”, ha a társadalom jobban integrált. Ha a civilizációs folyamat sokakat nem vagy csak részlegesen ér el, akkor a kimaradók óhatatlanul lent maradnak, vagy lecsúsznak. Ahhoz, hogy a fizikai és társadalmi életesélyek közötti távolságok vagy szakadékok ne nőjenek tovább, vagy épp csökkenjenek, már azon *források elosztását is befolyásolni kellene, amelyek a feltételeket alakítják. Azokat a feltételeket, amelyek képessé tesznek a civilizációs folyamatba való bekapcsolódásra* s a megszerzett civilizációs elemek megtartására.

7. Végül csak alá szeretném húzni Elias figyelmeztetését arról, hogy *a civilizációs folyamat nem egyirányú*. Noha csak egy lábjegyzet erejéig, de Elias már megemlíti a harmincas években írt műben, hogy „a civilizációs folyamat a külső veszélyek állandóan fokozódó korlátozásával zajlik. ...[ám] a civilizált viselkedés páncélja igen hamar szétpattanna, ha valamiféle társadalmi változás nyomán ismét akkora bizonytalanság, a veszélyek olyan kiszámíthatatlansága törne ránk, mint egykor...” (1987:832). A forradalmak, társadalmi kalamitások, háborúk, járványok, válságok és aztán egészen különleges módon a fasizmus, illetve bolsevizmus mindig a legkülönbözőbb decivilizáló hatásokkal jártak.<sup>12</sup> E krízishelyzetek hatása, a pokol teljes elszabadulása azonban valószínűleg nem azonos azzal a lassabb felbomlási folyamattal, amellyel most találkozunk a világ.

A társadalmak egészét vagy egyes csoportjait érintő kataklizmákban – háborúban, földrengésnél – a civilizáció egyes normái mindenkiről lepattanhatnak, mert a túléléshez betarthatatlanok. Elias említi a kés-villa használata elterjedése kapcsán, hogy (az I. világháborúban) „a lövészárokból a tisztok és közkatonák újból késsel és a kezükkel ettek”. Ő ezt úgy magyarázza, hogy a „veszélyeztettségi küszöb a kikerülhetetlen helyzet nyomása alatt viszonylag igen gyorsan

<sup>12</sup> Most van keletkezében egy a decivilizáció kérdéseit középpontba helyező irodalom, amelyre itt csak utalhatok (Mennel, 1990; Duclos, 1993; Fletcher, 1995).



san eltolódott” s ez nyilván sok mindenre igaz. Ha nincs víz, senki nem tud megfürdeni. Ha az éhenhalástól csak az utcán elhullott lótetemek mentenek meg, mint Pesten 1945 tavaszán, akkor a magyar kultúrában a lóevéstől való, elterjedt idegenkedést mindenki le fogja küzdeni. Mindez – éppen, mert közös sorsról és közös gyakorlatról van szó – nem érinti a civilizációnak azt a lényegét, hogy segít együtt élni egy adott társadalomban.

Más a helyzet akkor, amikor a civilizációs folyamat eredeti irányától lassan, fokozatosan kezd eltérni, az eredetitől eltérő irányba fordul, s tartóssá válik. Az ilyen felbomlások sem ritkák – elég a Római Birodalom bukására utalni. Engem itt és most csak az érdekel, hogy a ma tapasztalható folyamatok – nevezzük globalizációnak, neoliberais paradigmaváltásnak, posztmodern transzformációnak, vagy aminek akarjuk – értelmezhetők-e civilizációs fordulatként, s ha van irányváltás, annak melyek a sajátosságai és következményei. Azt hiszem, hogy az új médiumokkal és informatikával összefüggő globális kulturális változások, amelyeket gyakran a hagyományos európai civilizáció romlásaként értelmeznek, még valahogyan beilleszthetők a fent leírt értelmezési keretbe. Amiben én a valódi és veszélyes váltást látom, az nem annyira a „macdonaldosodással” függ össze. Az még akár egy közös, habár békésen differenciált kultúra része is lehet.

Az igazi baj az, hogy ez a folyamat nem közös sors. Nem mindenkit sújtó kataklizma, csak egyes – nem véletlenszerűen kijelölődő – egyének és csoportok sorsa. Az új paradigmában a civilizációs vívmányok már csak azoknak járnak vagy jutnak, akik meg tudják azt maguknak szerezni. A többiek az összetartó pántokon kívülre kerülnek. E „többiek” pedig azok lesznek, akik legkésőbb kerültek be a civilizációs áramba, akiknél a feltételek még nem közeledtek eléggé a „normához”, akiknél nem volt elég idő, hogy a külső kényszerek bensővé váljanak. S ami lefoszlik róluk, vagy amitől kényszerűen megfosztódnak, az nemcsak a külsődleges szokások halmaza, hanem az együvé tartozás tudata is, s mindaz, ami normákban, viselkedésben, értékekben ezzel jár.

## Az állam szerepe a civilizációs folyamatokban

Eddig szándékosan hallgattam arról, hogy van-e az államnak kitüntetett szerepe a civilizációs folyamatban. Hogy az összefüggés fontos, az természetesen nem saját ötletem. Eliasnál ugyan nem központi e kérdés, de nem elfelejtendő. Sok hasonló utalás mellett így ír: „Egy csomó jelenbeli megfigyelés is erősíti azt a gyanút hogy a »civilizált« viselkedés kiépülése a legszorosabban összefügg a nyugati társadalmaknak »államok« formájában történő szerveződésével.” (Elias, 1987:92)



Swaannál az összefüggés egyértelmű, hiszen a könyv egésze arról szól, hogyan alakította az állam az oktatást, az egészségügyet, a jóléti ellátásokat (Swaan, 1988). Elméleti keretének egyik fő pillére az, hogy kollektív kihívásokra a közösségek és intézményeik szociogenezisével alakultak ki válaszok, amelyek végül az egyéneket is, közösségeiket is alakították. „Az államalakulás, a kapitalizmus fejlődése, továbbá a városiasodás és szekularizálódás ezekkel együtt járó folyamatai adják e tanulmány magyarázó történelmi hátterét. Az egymással való versengésben az államok bürokratikus hálózatokat építettek ki, amelyek az embereket adófizetőként, újoncként, diákként, pacienseként, ellátást igénylőként, választóként összekapcsolták, s így modern értelemben vett polgárokká formálták.” (Swaan, 1987:2)

A civilizáció fentebb elősorolt ismérvei és feltételei mindezen előzményektől függetlenül is kényszerítenek arra, hogy fel- és elismerjük az állam szerepének szükséges voltát.

Amikor a *civilizációs ágensekről* volt szó, csak a következtetést kellett volna kimondanom. A hagyományosan legfontosabb szocializációs ágens, a család, nem adhatott át mást, mint saját kultúráját, ez pedig a korai hierarchizált társadalmakban élesen elkülönülő világokat jelentett. Az egyházak nem tudtak a modernítésre fókuszítani. A spontánul építkező kisebb szerveződések, még ha „nevelő” vagy civilizáló céljuk nyilvánvaló is, mint például az önszegélyező egyesületeké, ugyanúgy nem jutottak el mindenkihez, mint az üzemek. „Mindenkihez” a modern világban csak az állam juthat el. Nála összpontosulnak az ágenseket működtető források is, a kényszerítő eszközök többsége is, legyen szó fizikai, jogi vagy szimbolikus erőszakról. A bémunkások státusát és méltóságát, végső soron egyenlő polgárrá válását például a *szabad munkavállalás* (azaz a piac) mellett a *munkajogok és protektív szociális jogok* biztosították, amelyek megszerzését az ugyancsak jogszerűvé vált szabad szervezkedés segítette. Mindeme jogokat az államnak kellett garantálnia.

Amikor azt a kérdést tettem fel, hogy mi módon közelíthetők a hatékonyabb diffúziót segítő civilizációs feltételek, a válaszhoz ismét az államra kellett volna hivatkoznom. Ez már nem a csak szabályozó vagy rendfenntartó állam, hanem az *újraelosztást társadalmi méretekben szervező intézmény*. Kétségkívül lehet javakat a szegényebbek javára egyéni jótékonykodással vagy szolidarisztikus közösségek révén is átcsoportosítani, ezek azonban sosem foghatnak át mindenkit, s hatékony átcsoportosításra kevés az erejük vagy akaratuk, illetve az adakozók elemi érdekei mondanak ellent jelentősebb újraelosztó törekvéseknek. A kezdő feltételek érdemleges módon nem közelíthetők, azaz a civilizációs munka nem lehet hatékony szabályozások, jogok, továbbá redistribúció nélkül. A munkások nyomorúságos helyzete nem javulhatott a



már említettek mellett olyan munkához kapcsolódó jogok kikényszerítése nélkül, mint a munkavédelem, munkaviszony szabályozása, „megélhetési bérek” (Castel, 1998). Az általános létfeltételek (út, víz, csatorna stb.), az oktatás, az egészségügyi ellátás nem érhetnek el mindenkit tisztes szinten elvonások és újraelosztás nélkül.

Az egyetlen jogokat biztosító és forrásokat osztársadalmi szinten átcsoportosítani képes intézmény a társadalom által erre felhatalmazott állam. A pozitív irányú (fentről lefelé áramló) újraelosztás persze csak lehetőség, nem következik be szükségképpen. És természetesen a jogalkotást és redistribúciót az állam más célokra – saját hatalma erősítésére, az erősebb csoportoknak való kedvezésre, a társadalmi integráció és az átfogó civilizációs folyamat gyengítésére – is felhasználhatja. Ahhoz, hogy az állam a társadalom egészét szolgáló civilizációs ágensként működjék, *valószínűleg egy az államot magát, illetve a politikai osztályt „civilizáló” történelem kell*, amely kikezddhetetlenné teszi az erős jogállamiságot, a működő demokráciát, a hatékony civil kontrollokat. A 22-es csapdája az, hogy a civil társadalom jogok és források nélkül nehezen válik hatékony erővé.

Kissé általánosabban fogalmazva, a nemzetállam funkcióinak és monopóliumainak alakulása az utóbbi 200–300 évben valamilyen *haranggörbén* ábrázolható. Legkorábban a területszerző és területvédő katonai funkciók alakultak ki, s hamarosan követte ezeket a belső biztonságot védő törvényhozói-jogi funkció, amely egyre inkább igyekezett az erőszak eszközeit monopolizálni.<sup>13</sup> A mind bonyolultabb és szövevényesebb gazdasági és társadalmi működés egy sor köz-igazgatási, szabályozási, infrastruktúra-építő funkciót tett szükségessé. A kora kapitalizmussal növekvő és változó arcú szegénység a rendőri funkciók erősítését követelte ki, olykor kiegészítve ezt a szegénységet enyhítő feladatokkal.

#### 1. táblázat

Összes kormányzati kiadás a GNP vagy nemzeti jövedelem százalékában  
(központi és helyi költségvetés együttl), 1850–1910

Év (közelítően)	Ausztria	Franciaország	Nagy-Britannia	„Németország”
1850	11	9	12	12
1900	15	16	14	14
1910	17	15	12	16

Forrás: Mann, 1993:367

<sup>13</sup> Hosszú idősoros és összehasonlítható állami költségvetési adatokat egyelőre csak Mann-nál (1993) talál-tam. A korai nemzetállam forrásainak általában alacsony szintjét az 1. táblázat, a katonai kiadások indulás-kor túlnyomó, később többnyire csökkenő szerepét a 2. táblázat mutatja be.



*A civil és katonai kiadások aránya a teljes állami költségvetésen belül*

Év	Ausztia (kp)		Porosz- (Német)ország		Francia- ország		Nagy- Britannia	
	Civil	Kato- nai	Civil	Kato- nai	Civil	Kato- nai	Civil	Kato- nai
1780	28	51	8	84	24	33	7	66
1800	14	61	22	74	24	64	5	31
1830	35	33	50	34	47	30	18	28
1860	39	51	49	36	17	39	34	25
1890	39	19	25	78	32	34	37	36
1910	60	16	40	52	40	37	47	40

Forrás: Mann, 1993: 373, kiemelt évek. Mann a táblát eredeti forrásokból állította össze, összehasonlítás céljaira átszámítva. A teljes költségvetést három tételre bontotta: civil, katonai és adósszolgálati csoportra. A civil kiadások ekkor elsősorban közigazgatást jelentenek.

Ahogy – többek között az élesedő verseny folytán – bonyolódott a munkamegosztás, s ahogyan ezzel mélyültek, intenzívebbé lettek az „emberi egymásrautaltság” láncolatai (Elias, 1987:705 és köv.; Swaan, 1988: több helyen), úgy került sor arra, hogy az állam is belépjen a civilizáló ágensek közé. Már utaltam arra, hogy az egyházi oktatás nem tudta követni a modernizálódó világ szükségleteit; hogy a gyár csak azokat érte el, akik üzemekben dolgoztak, s mellesleg távolról sem követte minden tőkés az oweni mintát. A sűrűsödő városok közegészségügye (a csatornázástól és vízellátástól a járványügyig) közbeavatkozást igényelt, mert a „potyautasság” miatt másként nem volt megoldás. Az új kockázatok és új biztonságigények nyomán létrejöttek a társadalombiztosítási rendszerek, amelyek azután erősítették a hosszabb távú előrelátásra, a jövő tervezésére hajló beállítódást. Végül pedig kialakult egy olyan szemlélet és szükséglet, ami a mindennapi élet biztonsága mellett a feltételek „emberhez méltó” színvonalát is követelménnyé formálta.<sup>14</sup> Ezzel a korábban olykor csak a szegények számára kialakított és szegényes intézmények köre szélesedett, és színvonaluk javult.

A civilizáló funkciókból így nőttek ki mindenkit átfogó, kollektív, kötelező és nemzeti intézmények (Swaan, 1988), amelyek jóléti funkciója, integratív szerepe jelentőssé vált. *Az állami növekedési görbe felszálló ága nagyjából az 1980-as években tetőzött.*

<sup>14</sup> A 3. táblázatból világosan látszik, hogy e téren jelentős fordulat csak a II. világháború után, sőt inkább az 1960-as évek után következett be.

*Államilag finanszírozott szociális szolgáltatások a GDP százalékában*

Év (közeli- tően)	Ausztria	Francia- ország	Nagy- Britannia	Hollan- dia	Dánia	„Német- ország”
1900	–	–	0,7	–	1,0	–
1920	2,0	2,8	4,1	3,2	2,7	7,5
1940	2,3	5,1	5,3	4,4	4,8	11,1
1960	7,3	8,9	9,6	8,7	7,6	14,9
1975	10,8	9,2	15,0	17,2	24,6	20,8

Forrás: Flora, 1983, I.: 348–9. idézi Tilly, 1995:121

Az állami funkciók növekedésének folyamata Közép-Kelet-Európában is zajlott, ha sok tekintetben más módon és ütemben is, mint nyugaton. A hatás kiszélesedése az utolsó évtizedekben e régióban a korábbinál markánsabb, bár a nyugatinál sokkal problematikusabb volt – a szűkösebb források, a diktatórikus kényszerek s nem utolsósorban a történelmi idő rövidege miatt. Annyit mégis merek állítani, hogy az államszocializmusnak legalábbis a mi régióinkban a legegységelműbb pozitív hozadéka a civilizációs szakadék csökkentése Nyugat és Kelet között, illetve a lent és fent valamelyes egymáshoz közelítése az országon belül.

Újabb az állam visszavonulását szorgalmazó hangok mindenütt felerősödtek. Szűkülnek azok a források, s gyengülnek azok az intézmények, amelyek korábban a közös civilizációt próbálták építeni. A jelek szerint a mai társadalmak igyekeznek a korábbi állami funkciókat kiváltani piaccal, önkéntes „non-profit” szerveződésekkel, egyéni jótékonyssággal vagy egyes funkciók családra visszahárításával. Csakhogy ezek ma éppúgy nem tudnak mindenkit átfogni, s éppúgy nem tudnak forrásokat hatékonyan átcsoportosítani, mint akkor, amikor az állam e funkciókba belépett. Sőt, a sűrűbb és komplexebb társadalomban még a korábbinál is kevésbé működnek a régi megoldások. *Az uralkodó ideológia viszont úgy működik, hogy természetesnek tüntesse föl a gyöngék kiszorulását azon forrásokból, amelyek révén korábban egy közös folyamat részesévé kívánta őket tenni.* Ezért igaz az, hogy a „minimális állam” első renden a civilizációs folyamatot károsítja.

Az állami funkciók gyengülése némileg ellentmondásos. A civilizációs páncélok gyengülésével, a kiszorító folyamatokkal ismét veszélyessé válik a szegénység. A jobb helyzetű csoportok, amelyeknek legtöbb a félteni valójuk, ismét kikövetelik az állami belső elnyomó, illetve erőszakfunkció erősítését (amelynek szükségességét a globalizálódással járó, félelmet keltő mozgások is legitimálják). Sőt,



minthogy az adófizetésből fenntartott, mindenkit védő erőszakhoz túl sok adót kellene fizetni, az állam mellé bevonják a piacon vásárolt erőszakot. Ezzel egy másik haranggörbe rajzolódik ki: az állami monopóliumok, így az elsők között megjelenő erőszakmonopólium első szakaszban való erősödését e monopólium gyengülése követi. Sorra megkérdőjeleződnek más állami monopóliumok is – a piac motorját, a versenyt állítva ezek helyébe. A tapasztalat azt sejteti, hogy nem minden monopólium társadalmi természete egyforma. Az bizonyos, hogy a monopóliumok társadalmi kontrollja mindig elengedhetetlen. Az azonban kérdéses, hogy megtörésük mikor és kinek használ. Az állami erőszakmonopólium megtörése például a jelek szerint egyértelműen az erőseket erősíti tovább, a decivilizált erőszakhasználatot gerjeszti. A minimális állam híveinek törekvései „sikerebbnek”, azaz gyorsabbnak és határozottabbnak tűnnek Európa keleti, mint nyugati térfelén, de a nyomás mindenütt erős.<sup>15</sup> Hatásai – nálunk inkább, mint nyugaton – már ma is érezhetők, s egy (alkalmasint súlyos következményekkel járó) decivilizációs folyamat bekövetkeztét vetítik előre.

4. táblázat

Állami szociális kiadások a GDP százalékában

Év	Ausztria	Franciaország	Nagy-Britannia	Hollandia	Dánia	Németország <sup>+</sup>
Összes szociális közkiadás (transzfer és szolgáltatás)*						
1960	16	13	10	12	–	18
1970	19	17	13	22	19	17
1980	23	23	16	28	27	23
Összes szociális közkiadás (transzfer és szolgáltatás)**						
1980	22	24	18	29	28	25
1990	24	26	20	28	28	24
1993	26	29	23	30	31	29

Forrás: \* OECD, 1994:57–58; \*\* OECD 1996:17–18. (A szociális közkiadások definíciója egy-egy kiadványon belül azonos, de folyamatos korrekciók miatt az időben némileg változhat, illetve a statisztikák pontossága nő.) <sup>+</sup>Nyugat-Németországra vonatkozó adatok.

15 A 4. táblázat szerint a jóléti állam halálára vonatkozó sűrű állítások Nyugat-Európára nézve leginkább öncsalásnak, ha nem egyszerű hazugságnak vagy wishful thinkingnek tekinthetők. Az állami elvonások rendre 45–50% körül vannak. A szociális kiadások a növekvő nemzeti terméken belül arányukban alig változnak, enyhe növekedésre és enyhe csökkenésre egyaránt van példa. Ugyanakkor jelentősek a belső átalakulások, az irányváltásra irányuló tervek, ám ezek kimenete nehezen becsülhető előre a változó politikai klímában. A jóléti kiadásoknak az a radikális és katasztrofális csökkenése, ami Magyarországon 1989 óta bekövetkezett, s ami jóval nagyobb volt, mint a GDP csökkenése, nyugaton nem követett politikai recept következménye (5. táblázat).

5. táblázat

Szociális kiadások Magyarországon, 1989–1996  
(A kiadások tartalma nem teljesen azonos a nyugati országokéval)

Megnevezés	1989	1991	1996	1996/1989
Ártámogatás	2,6	1,8	0,7	23%
Egészségügy	5,7	7,6	5,3	81%
Oktatás, kultúra	7,0	9,3	7,7	96%
Lakástámogatás	3,5	2,5	0,9	22%
Munkanélküliség	0,0	0,7	0,7	–
Nyugdíj	9,1	11,3	9,1	87%
Segélyezés	0,3	0,9	1,6	464%
Családtámogatás	4,0	4,6	2,2	48%
Táppénz	1,2	1,3	0,5	36%
Összesen, a GDP %-ában	33,4	39,9	28,6	75%

Forrás: TÁRKI (1997)

## Összefoglalás és következtetés

A 15–17. századtól kezdve (a kezdet országoként változó) az átalakuló gazdasággal, technikával, urbanizálódással, átalakuló környezettel és létfeltételekkel felületi és mélyebb változások sora indult el. Elias értelmezése szerint a többnyire a felső rétegekből induló impulzusok nyomán új szokások és érintkezési formák terjednek. Átalakultak a kisebb és nagyobb közösségekhez, azaz a másikkal és másokhoz, valamint a térhez, az időhöz, a természethez és természetfelettihez való viszonyaink. A jövő például Isten titokzatos rendelkezéséből az emberi tervektől is függővé kezdett válni. Az állami erőszak-monopólium a mindennapi életet (legalábbis az ún. békeidőkben) pacifikálta. E változások lassan beszívódtak a személyiség mélyebb rétegeibe, a külső kényszereket belsővé alakítva.

Mindezt elfogadva mégis szembesülünk egy paradoxonnal. A civilizáció a társadalmi együttélést teszi lehetővé, azaz a társadalom egészéé. *Elvben mindenké, ám „magától” nem jut el mindenkire.* Terjedéséhez olyan feltételek kelljenek, amelyek eléggé hasonlóak a társadalom egyes rétegeinél ahhoz, hogy követhetővé, asszimilálhatóvá és racionálissá tegyék a többnyire fentről kiinduló gyakorlatokat. Általában azonban az automatizmusok kevesek a folyamat kiteljesítéséhez. Többnyire szükség van ún. civilizációs ágensekre, amelyek a fizikai és



szimbolikus erőszak valamilyen elegyével rákényszerítik a többségre azt, amit a hatalom az általa óhajtott együttéléshez elengedhetetlennek tart. A fizikai erőszak kevés a mély változások eléréséhez. A gazdasági erőszak kétélű. A leg-hatékonyabb a kifinomult és rafinált szimbolikus erőszak lehet. A nagy nehézség az, hogy végül is honnan teremthetők források ahhoz, hogy azok a bizonyos, az adaptálást lehetővé és értelmessé tévő feltételek kialakuljanak, megvalósuljanak. Ebben vált perdöntővé az állam és az állami újraelosztás, illetve az integratív jellegű közös intézmények szerepe.

Ha ezek nincsenek, vagy ha egy bizonyos szint elérése után az erőfeszítések meggyengülnek és a források beszűkülnek, akkor a folyamat elakad, s előbb-utóbb visszajára fordul. Ez a ma még beláthatatlan decivilizációs veszély, a társadalom szétesése bent maradókra és kirekesztettekre.

A decivilizáció első áldozatai a munka nélkül maradók, a hajléktalanná válók, a civilizálatlan, azaz deregulált munkaerőpiac új páriái s mindazok, akik alacsony jövedelmük miatt nem juthatnak hozzá azokhoz a legelemibb alapszükségletekhez – gyógyszer és orvosi ellátás, hajlék és annak fenntartása, legalább egy piacképes szakma elsajátítása –, amelyekért korábban részben vagy egészben a köz felelősséget vállalt.

Az ő le- és kiszakadásuk megváltoztatja a civilizáció egész arcát. A most már beszűkült, de normaszabó társadalom számára mind feleslegesebbek és egyre gyűlöltebbek. Hogyan is válaszolhatnának hát másként kirekesztésükre, mint önfeladással, vagy azzal, hogy szembefordulnak a kitaszítókkal? A nyomor új fenyegetései pedig „odafent” kiváltják a köz- és magánerőszak új formáit. Az iskolákra, gyógyításra fordított pénzből az elnyomó szerveket kell erősíteni, börtönöket kell építeni. Ám a gazdagokat ez sem védheti meg teljesen, ezért gyengül az állami erőszak-monopólium, létrejönnek a fegyverhasználatra is jogosított magánrendőrségek. A sokasodó új szegényeket, hogy kirekesztésük legitimálható legyen, a hatalom bűnbakká teszi, s ebben a mechanizmusban tenyészik a rasszizmus és idegengyűlölet. Mindezzel gyengül a társadalmilag oly nehezen elsajátított tolerancia, idejétmúlnak tűnnek az átfogó szolidaritások, s a civilizálatlan vélt társadalmak eljutnak oda, hogy ismét tagadják minden egyén méltóságra való jogát. Mindez pedig végső fokon az európai civilizáció feladásához vezethet, vagy olyan átalakuláshoz, amelynek már nem sok köze van a humanista európai álmokhoz.

## Irodalom

- Ariès, P. (1973): *L'enfant et la vie familiale sous l'Ancien Régime*. Paris, Seuil, 1973.
- Benda Kálmán (1978): A felvilágosodás és a paraszti műveltség a XVIII. századi Magyarországon. In: Benda Kálmán: *Emberbarát vagy hazafi? Tanulmányok a felvilágosodás korának hazai történetéből*. Budapest, Gondolat, 1978, 287–308.
- Bourdieu, P. (1972): *Esquisse d'une théorie de la pratique*. Genève, Droz, 1972.
- Bourdieu, P., Wacquant, L. J. D. (1992): *An Invitation to Reflective Sociology*, The University of Chicago Press, 1992.
- Braudel, F. (1985): *Anyagi kultúra, gazdaság és kapitalizmus, XV–XVIII. század. A mindennapi élet struktúrái: a lehetséges és a lehetetlen*. Budapest, Gondolat, 1985.
- Braudel, F. (1987): *Grammaire des Civilisations*. Paris, Éditions Arthaud, 1987. (első kiadás: 1963.)
- Castel, R. (1998): *A szociális kérdés alakváltozásai*. Ford. Léderer Pál. Max Weber Alapítvány, Wesley Zsuzsanna Alapítvány és Kávé Kiadó, 1998.
- Duclos, D. (1993): *De la civilité. Comment les sociétés apprivoisent la puissance*. Éditions de la découverte, Paris, 1993.
- Elias, Norbert (1982): *The civilising process* vol II. *State Formation and Civilisation*. (1939, 1969) Oxford/New York: Blackwell/Pantheon, 1982.
- Elias, Norbert (1987): *A civilizáció folyamata. Szociogenetikus és pszichogenetikus vizsgálódások*. Gondolat Kiadó, Budapest, 1987.
- Elias, N., Scotson, J. L. (1994): *The Established and the Outsiders*. Sage Publications. London, Thousand Oaks, New Delhi, 1994.
- Ferge Zs. (1997): És mi lesz, ha nem lesz? Az állam és a civilizációs folyamat. In: *És mi lesz, ha nem lesz? Tanulmányok az államról a század végén*. Szerk.: Gombár Csaba–Hankiss Elemér–Lengyel László. Budapest, Helikon–Korridor Kiadó, 1997.
- Fletcher, J. (1995): Towards a Theory of Decivilizing Processes. *Amsterdams sociologisch Tijdschrift*, 22. Nr. 2. október 1995. 283–297.
- Flora, P. and al. (1983, 1987 eds.): *State, Economy and Society in Western Europe 1865–1975. A Data Handbook*. Frankfurt, Campus Verlag, 1983, 1987.
- Freud, S. (1951): *Civilisation and its discontents*. London, Hogarth Press, 1951.
- Freud, S. (1982): Rossz közérzet a kultúrában. In: *Esszék*. Gondolat Kiadó, Budapest, 1982.
- Heller Farkas (1947): *Közgazdaságtan*, II. kötet. (Reprint: Budapest: Közgazdasági és Jogi Kiadó, 1988.)
- Kalb, Don (1997): *Expanding Class: Power and everyday politics in industrial communities, The Netherlands. 1850–1950*. Durham and London, Duke University Press, 1997.
- Mann, Michael (1993): *The Sources of Social Power*. Vol. II. *The rise of classes and nation-states 1760–1914*. Cambridge, Cambridge University Press, 1993.
- Mennel, S. (1990): Decivilising Processes: Theoretical Significance and Some Lines of Research. *International Sociology*, vol. 5. no. 2. 205–223.
- New Lanark Coneservation (1989): *David Dale, Robert Owen and the Story of New Lanark*. Edinburgh, Moubray House Press, 1989.
- OECD. (1994): *New orientations for social policy*. Social Policy Studies, no. 12. OECD, Paris
- OECD. (1996): *Social Expenditure Statistics of OECD country members*. Labour Market and Social Policy Occasional Papers. no. 17. OECD, Paris



- Owen, Robert (1813): *A New View on Society and other writings*. Everyman edition.
- Petrák Katalin (1978): *A szervezett munkásság küzdelme a korszerű társadalombiztosításért*. Budapest, Táncsics Könyvkiadó, 1978.
- Rimlinger, Gaston V. (1974): *Welfare Policy, Industrialization in Europe, America and Russia*. John Wiley, New York, 1974.
- Swaan, A. de (1988): *In Care of the State: Health Care, Education and Welfare in Europe and the USA in the Modern Era*. Polity Press/Oxford University Press/New York, 1988. (Az oldalszámok az 1987. évi sokszorosított kiadást követik.)
- Swaan, A. de (1990): *The Management of Normality. Critical essays in Health and Welfare*. Routledge, London and New York, 1990.
- Szűcs Jenő (1983): *Vázlat Európa három történeti régiójáról*. Magvető, Budapest, 1983.
- TÁRKI (1997. október): *Az állam szociális kiadásai Magyarországon 1988–1996 között. Háttér tanulmányok a középtávú szociálpolitikai koncepcióhoz, 3.* Kut. vez: Tóth István György, írta Lelkes Orsolya.
- Tessedik Sámuel, Berzeviczy Gergely (1979): *A parasztok állapotáról Magyarországon*. Budapest, Gondolat Kiadó, 1979.
- Thompson, E. P. (1980): *The Making of the English Working Class*. Penguin Books, London, 1980.
- Tilly, Charles (1990): *Coercion, Capital and European States, ad 990–1992*. Oxford UK., Cambridge US: Blackwell, 1990.





## **X. FÖLDTUDOMÁNYOK OSZTÁLYA**





Marosi Sándor

az MTA levelező tagja

# A FÖLDRAJZI TÁJKUTATÁSOK ÖSSZETETTSÉGE ÉS ALKALMAZHATÓSÁGA

Elhangzott 1996. február 13-án

Témaválasztásomat elsősorban az indokolhatja, hogy immáron ötödik évtizede egyes tájalkotó tényezőkre korlátozódó kutatásaimat is adott tájon végeztem, majd komplex tájföldrajzi szemlélettel korán felismertem, hogy olyan összetett munka és képzettség kell a földöveket főleg morfolitogén hatásokra egymástól elkülönülő tájakra tagoló ilyen egységek, a bennük érvényesülő kölcsönhatások felismeréséhez, értelmezéséhez, amihez a geográfus egyedül általában kevés, kell hozzá a rokon tudományi specialistákat is felölelő munkaegyüttes. Ezért igyekeztem egész pályafutásom alatt számos rokon szakma jeles képviselőitől tanulni, velük együtt dolgozni, s nem csupán a földtudományok képviselőivel, hanem ún. „élet-” és „társadalomtudományi” szakemberekkel is.

Az „összetettség” tehát nem csupán a témában, tematikailag, hanem gyakran a „team”-ben is jelen van. Az „alkalmazhatóság” pedig minden tudományos kutatás célja kell, hogy legyen, s ezt rövid előadásomban is igyekszem néhány példával tanúsítani.

A mondottak miatt az alábbiakban mellőzöm azon kutatási eredményeimnek az összefoglalását, amelyeket ugyan egyes tájainkban, regionális vizsgálá-

tok során értem el, de tényező-, ill. ágatzatkutatás-szintűek, általános földrajzi (felszínfejlődés-történeti, geomorfológiai, homok- és löszgenetikai, ill. -morfológiai, geokronológiai, hidrogeográfiai, paleopedológiai stb.) jellegűek (pl. újpleisztocén folyóteraszok megkettőződésének igazolása, új homokformák felismerése és genetikai magyarázata, deráziós völgyek értelmezése, a Balaton kialakulásának módja és kora, hordalékkúpok, periglaciális formák kimutatása, magyarázata stb.). A regionális, pontosabban a *földrajzi táj kutatások témakörére koncentrálok; előbb rendszertani, elvi-általános, szemléleti kérdésekre, majd különböző dimenziókban végzett kutatási eredményekből szemelvényezek*, hiszen ebben az időkeretben csak ízelítőül, példák bemutatására vállalkozhatom.

## Tudományrendszertani-fogalmi, elvi-általános kérdések, előzmények

Az egyik legrégebb tudomány, a klasszikus ókorban kialakult geográfia két és fél évezredes fejlődése folyamán – a mindenkori társadalmi-gazdasági igényekhez többé-kevésbé igazodva – tárgyát, feladatkörét, céljait és módszereit többször változtatta, korszerűsítette. A Földünkön kívüli világgal való foglalkozás egyre inkább más tudományok feladatává vált, s a Földünkön lejátszódó természeti és társadalmi-gazdasági folyamatok, törvényszerűségek, valamint eredményeik vizsgálatára is – *jórészt a geográfiából kivált* – újabb tudományok sora jött létre. Ennek ellenére sem mondott le a geográfia a Földön végbemenő természeti és gazdasági-társadalmi folyamatok, azok egymásra hatásának, az ember, az embercsoportok, a társadalmak környezetének differenciált és komplex tanulmányozásáról. *A geográfia is sokoldalúan tagozódott.*

*Természettudományi* (természetföldrajz) és *társadalomtudományi* (gazdaság-, népesség- és településföldrajz) *kettőssége, általános* (folyamatvizsgálat, törvényszerűségek feltárása), *tényező*, ill. *ágazati* (a természetföldrajzban: felszínalak-tan, éghajlat-tan, vízföldrajz, növény-, állat- és talajföldrajz; a társadalom- és gazdaságföldrajzban: mezőgazdasági, ipar-, népesség-, település-, közlekedés-, kereskedelmi, idegenforgalmi földrajz stb.) és *területi* (regionális: körzet-, rajon-, tájföldrajzra) tagolódása, idő- és térszemlélete érthetővé teszi, hogy széles tudományterületeket érint, sőt ölel fel. Ezek a földrajzi diszciplínák a rokon tudományok, mindenekelőtt a földtudományok, az agrártudományok, a biológiai, de a közgazdasági, a műszaki, a településtudományok, a demográfia, a szociológia stb. felé is egyre inkább *hidakkal* kapcsolódnak.

A chorologikus szemlélet következetes és tudatos alkalmazásával a *tájtan* alapjait lerakó A. v. *Humboldt* munkássága (1836, 1845–1858) óta hosszabb-rövidebb időre ugyan háttérbe szorulhatott tudományunkban a *földrajzi térszemlé-*



let [amelyet *Vidal de la Blache* (1913, 1927) társadalmi-gazdasági elemekkel bővített], de lényegében tudományunk fontos alapköve kellett, hogy maradjon. Jelentősége a tudománytörténeti fejlődés során jórészt a földrajzi dualizmus és monizmus harcának, a természeti és társadalmi-gazdasági jelenségek *kapcsolatrendszere* értelmezésének függvényében alakult.

A múlt század végén, a richthofeni általános földrajzi koncepció bírálataként és ellenhatásaként kerülhetett sor arra a felismerésre, hogy az általános természetföldrajz sohasem juthat belső egységre, mert kauzális viszonylatai nem kutathatók önmagukban, csak *területi* vonatkozásban. *Supan*, majd *Richter* is hangoztatták, hogy a földrajz tulajdonképpen magva a *tájismeret*. Ennek fontossága mellett szálltak síkra *Partsch*, *Hettner*, *Passarge*, *Granö*, *Berg* és *Teleki* is.

Századunk elejének földrajza az általános földrajzban megelőzőleg uralkodó dualisztikus felfogást a *tájföldrajzi szintézisben* oldotta fel.

*Passarge* hirdette elsőként, hogy a tájak nem szabálytalanul elszóródó területi individuumok, hanem az éghajlati és növényzeti öveknek megfelelően zonális elrendeződést mutatnak. Az ő tájismeretében az éghajlati és növényzeti zónák tájövekként szerepelnek, amelyek azonosak *Granö* földrajzi zónáival. *Hettner* véleménye szerint viszont zónák és tájak között nincs genetikai kapcsolat, hanem a táj mint a tájképző tényezők térbeli kapcsolata, chorologikus, statikus fogalom. *Ringier* szerint viszont a táj dinamikus fejlődéstörténeti komplexum.

*Dokucsajev* az egységes és osztatlan földrajzi burok taxonómiai egységeként ismerte fel a *földrajzi zónát*. *Berg* szerint a zóna tájakból tevődik össze.

*Magyarországon* századunk második negyedéig lényegében semmilyen táj kutatás nem történt. A Magyar Földrajzi Társaság szervezésében, *Lóczy* Lajos irányításával, a legkülönbözőbb tudományterületek széles körű összefogásával 1891-től folytatott Balaton-kutatás és páratlan eredménye, a 32 kötetes, két nyelven közreadott monográfiásorozat sajátos műfaj, ám nem tekinthető táj-földrajzi feldolgozásnak.

*Teleki* Pál csak 1917-ben fogalmazta meg a komplex táj kutatások feladatát; azok elvileg polgárjogot is nyertek a magyar földrajzban, de arra már nem került sor, hogy valamennyi tájfaktort komplexen kutató munkaközösségek alakuljanak egy-egy táj részletes feltárása céljából. Csupán *Prinz* Gy. (1936) adott tájlemezéseket, de fejtegetései csak általános jellegűek voltak. Az 1930-as években nagyobb vállalkozásra is került sor *Kogutowitz* K. részéről (1930–1936), aki a Dunántúlt és a Kisalföldet felölelő tájrajzaival az egységes földrajz alapján állva, kevés analitikus vizsgálatra, de gazdag forrásanyagra támaszkodva, figyelemre méltót alkotott. Hasonlóképpen gazdagította szakirodalmunkat



Fodor F. Jászságról írt műve (1944). Rövid tájrajz jelent meg *Bulla B.* tollából az Alföldről és a Kisalföldről (1940, 1941), de ezután csak általános földrajzi, főleg geomorfológiai kutatások folytak az ötvenes évek elejéig.

Az ötvenes években szervezeten megindultak Magyarországon is a tájkutatások, amelyek első gyümölcseként *Láng S.* a Börzsöny és a Mátra (1955), *Ádám L.–Marosi S.–Szilárd J.* a Mezőföld (1959), *Borsy Z.* a Nyírség (1961) területét komplex földrajzi feldolgozásban felölelő tájmonográfiái jelentek meg.

Ezek a munkálatok miként gyakran más országokban, úgy Magyarországon is több problémát vetettek föl. Ezek egyike abból következett, hogy főként az előző fél évszázadban – jórészt gyakorlati igények miatt – a tudományok egész sora vált le a geográfia testéről, és lettek önálló tudományokká, mégpedig olyan önálló tudományokká, amelyek részben természetszerűen adódó, részben tervszerűen megteremtett lehetőségeik révén sokkal inkább rendelkeztek azokkal a módszerekkel, anyagi eszközökkel és személyi feltételekkel, amelyek szükségesek egy-egy tájtényező vizsgálatához és törvényszerűségeinek feltáráshoz, s hovatovább a geográfia, ill. a geográfusok jutottak abba a helyzetbe, hogy – kevés kivételtől eltekintve – nem voltak képesek megfelelően magas szinten művelni tudományuk minden ágát, s még kevésbé képes egy-egy kutató komplex táj kutatásra, a táj bonyolult kölcsönhatásokban és összefüggésekben megnyilvánuló faktorainak részletes feltáráására. Ezt a munkát általában munkaközösségek kellett, hogy végezzék, amelyek egyesítették magukban a geomorfológust, a klimatológust, a hidrogeográfust, a növény- és talajföldrajzost, s esetleg más, rokon tudományi szakembereket. Ez azonban gyakran azt eredményezte, hogy a tájfeldolgozás *enciklopédikus jellegű* lett, amely igen sok, a tájra vonatkozó ismeretanyagot ölelt fel valamennyi tényezőre vonatkozóan, de *hiányzott* belőle a lényeg, valamennyi tényező összefüggéseinek megvilágítása, a *geográfiai szintézis*. A tiszteletre méltó egyszerűs (pl. *Láng-, Borsy-féle*) tájföldrajzi monográfiáktól eltekintve ilyen volt a mesterem, *Bulla Béla* ösztönzésére, *Ádám L.* és *Szilárd J.* kollégáimmal az ötvenes évek elejétől a Mezőföldön végzett táj kutatásunk, amelynek során hárman a paleogeográfiai-geomorfológiai részletes felvételezést és feldolgozást, *Szilárd* barátommal ezenkívül a vízföldrajzi értékelést végeztük el, de a többi tájtényezőt a klimatológus *Hajósy F.*, a botanikus *Boros Á.*, a zoológus *Loksa I.* és a talajföldrajzos *Korpás E.* szintetizálta. (Zárójelben jegyzem meg, hogy szervezői-szerkesztői feladatkörömön kívül ennek a munkának a keretében részese lehettem az első hazai, részletes terepkutatáson alapuló, 1:100 000 méretarányú geomorfológiai térkép elkészítésének.)

Hasonló, a maga nemében igen értékes mű született *Pécsi M.* szervezésében, szerzői-szerkesztői közreműködésemmel a *Budapest természeti képe*



című, 20 szerzős, neves rokontudományi szakembereket felsorakoztató monográfia közreadásával; az igazán nagynevű szerzők többsége – sajnos – már örökre eltávozott (Bendefy L., Horusitzky F., Mauritz B., Papp F., Schréter Z., Bulla B., Láng S., Szilárd J., Bacsó N., Lászlóffy W., Zólyomi B., Loksa I., Fekete Z. stb.).

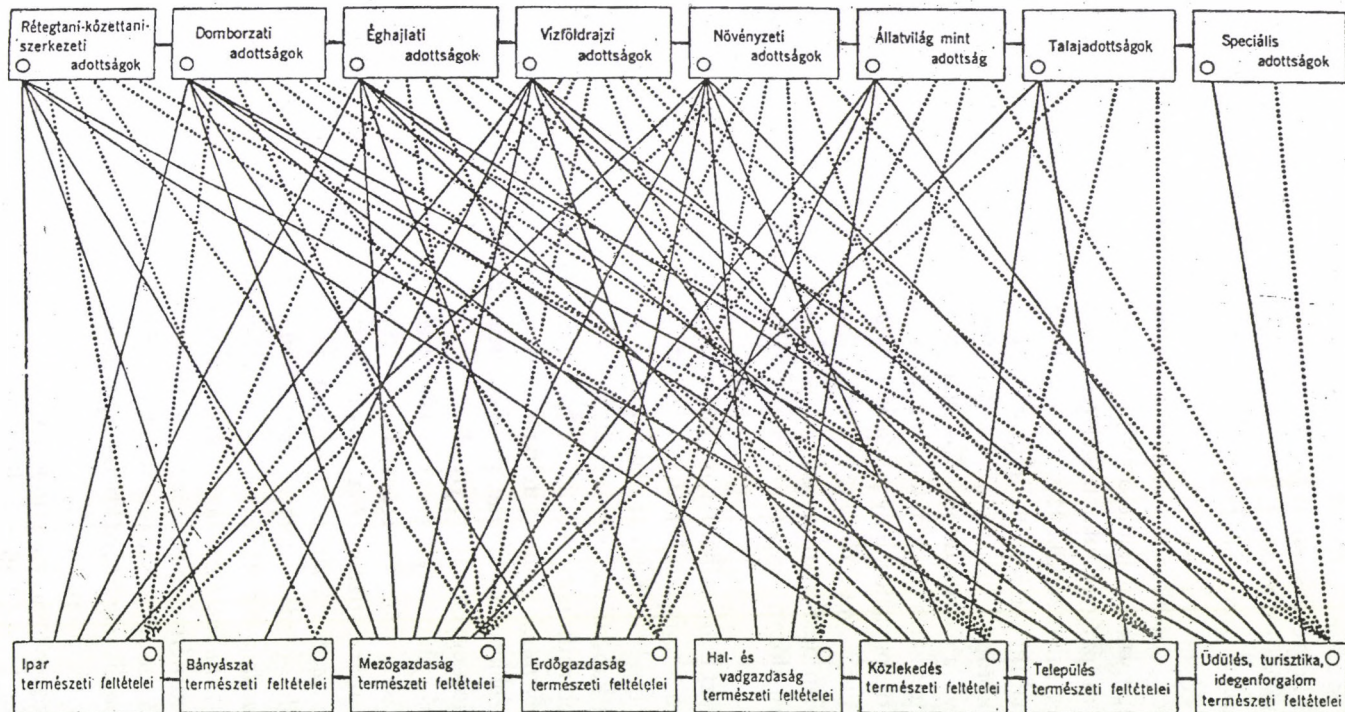
Eme enciklopédikus jellegűnek minősíthető, ám kétségkívül nagyon értékes ismeretanyagokat felölelő műben képviselt tudományterületek, különösen a tájföldrajz egyre inkább igényelték *alkalmazott ágazatuk* megteremtését. Az 1962. évi, nemzetközivé szélesített Földrajzi Konferenciánkon Szilárd J. kollégámmal megkíséreltük, hogy az akkor már évek óta folytatott sokoldalú terepi és komplex belső-, ill. külső-somogyi vizsgálataink eredményeire támaszkodva, a rokon tudományok ismeretanyagait is sajátos gyakorlati célok szerint szintetizálva, újszerű tájértékelő tanulmányt mutassunk be egy konkrét terület, a Somogyi-dombság példáján (Marosi S.–Szilárd J. 1962).

Erre épült a következő évben a nemzetközi tekintetben is úttörő *tájértékelési irányzat* elvi-módszertani megalapozása (Marosi S.–Szilárd J. 1963) és újszerű, összefüggéshálózati sémám (1. ábra), amely későbbi tájmodellek korai előzménye.

Mielőtt ezt bemutatnám, hangsúlyozom, hogy évtizedek óta a tájföldrajz is, de általában a *regionális kutatás reneszánszát* éli. A regional science (Isard, W.) ugyan későbbi keletű és társadalomtudományi diszciplína, s még nem igazán találta meg kapcsolatát, együttműködését azzal az alkalmazott tájföldrajzzal, aminek több mint három évtizede *gyakorlati indíttatása* is van: mindenekelőtt a *természeti erőforrások* kutatása, feltárása, ésszerű hasznosítása, a *területi tervezés*, a *terület- és településfejlesztés*, a *racióális környezetgazdálkodás* (egyensúlymegőrzés, a megbomlott egyensúly helyreállítása, a környezetben lejátszódó folyamatok kedvező irányú befolyásolása), a *környezet- és természetvédelem* tudományos megalapozására irányuló igény. Fontos felsőoktatási gyakorlati jelzés, hogy hazánkban már évtizedek óta Táj- és Kertépítési Tanszék, a KLTE-n több mint egy évtizede Alkalmazott Tájföldrajzi Tanszék működik.

A *társadalmi-gazdasági igények táplálta komplex földrajzi térszemlélet végül is a természet- és gazdaságföldrajz közeledése irányába is hat*, sőt korunk követelményei, a *tudományos-technikai forradalom* a geográfiát szélesesen övező, más diszciplínák kutatási eredményeit is a közös *integrálódás* irányába kényszerítik. Hiszen az időben lejátszódó társadalmi-gazdasági folyamatok eredménye a földrajzi környezetben is nagymértékben megmutatkozik, s a környezet is hat életünkre, tevékenységünkre.

A *természeti erőforrásokat* sem lehet a tértől elvonatkoztatva kutatni, feltárni és hasznosítani, hiszen befolyásolják az illető vagy a viszonylag nem távoli térség



1. ábra. A természeti adottságok mint a gazdálkodás természeti feltételei.  
A tájértékelés különböző nézőpontjai



potenciálját, gazdasági struktúráját, társadalmi életét. A szűkös vagy kedvezőtlen természeti adottságú területek kutatása különösen fontos kérdés.

*Az ember (társadalom) és környezete* közötti kapcsolatokat sem elég csak faktoronként, ill. ágazati szempontból, általánosságban kutatni. Miközben lég-, víz-, talajszennyeződésről, zaj-, ipari és egyéb ártalmakról, a hulladékok megsemmisítésének, újrahasznosításának problémáiról stb. esik szó, nem téveszthető szem elől, hogy bármiféle környezeti ártalom, károsodás, egyensúlybomlás konkrétan mindig egy-egy területen lép fel, egy tájban, régióban, településben, üzemben stb. (Természetesen többnyire nem is elszigetelten, hanem más hatásokkal, tendenciákkal együtt.)

A földrajztudományok legfőbb tevékenységi köre az időbeli folyamatok eredményeinek térbeli vizsgálata, a természeti és gazdasági ágazatok sajátosságainak az optimalizálást célzó feltárása, a fejlődésben, ill. fejlettségben mutatók szintdifferenciák okainak elemzése elsősorban a területi kutatások feladata, de természetesen az *ágazati kutatásokra* is kiterjed.

Hiszen akkor sem lehet elvonatkoztatni a területi kapcsolatoktól, ha a földrajzi kutatás tárgya csupán egy-egy természeti *tényező* vagy gazdasági *ágazat*. Az ágazat dominanciája szempontjából a térben különböző szinten eltérő mértékű, relatív homogenitással jellemezhető *tényező szerinti*, ill. *ágazati körzetek* rajzolódhatnak ki. A *területi típusok* egy nagyobb tér több, egymástól izolált részén ismétlődően előforduló, azonos vagy hasonló ismérvekkel jellemzett terek.

A komplex *természetföldrajzi* kutatások tárgyai a *komplex földrajzi terek*. A térben a természeti tényezők is együttesen és egymással kölcsönkapcsolatban hatnak. Ahol pedig ember él, és társadalmi tevékenységet folytat (termel, fogyaszt, közlekedik, szállít, kereskedik stb.), ott maga is igen aktív formálója a térnek. Ezáltal a tér komplex természeti és társadalmi-gazdasági hatások és mozgások színterévé válik. Uralkodó, ill. *jellemző tényezői alapján elhatárolódó* természeti tájak, műtájak, gazdasági körzetek, agglomerációk stb. keletkeznek.

A környezeti válság kirobbanása óta egyre gyakrabban merült fel a *környezet* és a *táj* fogalmak szinonim értelmezése (környezetvédelem, tájvédelem, környezetrendezés, tájrendezés stb.). A biológia az élő szervezetek és (élő és életelen) környezetük kapcsolatát vizsgáló tudományágat, az ökológiát már korán kifejlesztette (Haeckel, E. 1866). A „tájökológia” fogalom megalkotója Troll, C. (1939). A földrajztudomány hagyományos, de sokat vitatott térfogalma, a táj tiszta értelmezését időről időre az is nehezítette, hogy egyrészt a köznyelv is meglehetősen szabadosan használja valamilyen el nem határolt területre – különben 15–16. századi holland festőktől származik a táj (*landschap*) szó, s angolszász közvetítéssel terjedt el a geográfiában –, másrészt több tudomány alkotott tájfogalmat (néprajzi táj, mezőgazdasági táj, erdőgazdasági táj, talajtáj,



hidrológiai tájegység, üdülőtáj stb.). Sok definíciót mellőzve, a *környezet és táj fogalma* között pedig lényeges *különbségtétel* indokolt, amit az alábbiakban tettem meg (1980, 1981):

Bár szerintem a *környezet is, a táj is térkategória*, sőt négydimenziós, s mindkettő komplex – bennük a természeti és a társadalmi-gazdasági tényezők, hatások dinamikus kölcsönkapcsolatban, bonyolult hatásmechanizmusban, fizikai, kémiai, biológiai és társadalmi mozgások formájában jelen vannak –, egyrészt *területi elhatárolódásukban*, másrészt *legfőbb kapcsolatrendszerükben különbözőnek egymástól*.

A *környezet* fogalom minden esetben *feltételezettséget fejez ki és viszonylatot tételez fel*, mégpedig – grammatikai hasonlaltal élve – *birtok* egy olyan viszonylatban, amelyben a *birtokos* valamilyen élő, aktív szervezet. Ez lehet a növény- vagy állatvilág egyede vagy kisebb-nagyobb csoportja a családban, a lakó- vagy munkahelyen, az üdülőben, a színházban, a sporttelepen stb. (utóbbi esetekben a viszony csak topikus szinten és nem is állandó jelleggel áll fenn!); nagyobb emberi közösség a településben, a megyében, az országban, ország-csoportokban, tágabb értelemben a Földön.

Utóbbi esetekben tehát kisebb-nagyobb társadalmi csoportok, ill a társadalom földrajzi környezetéről beszélünk, s vizsgálódásunk szemléletét *szocio-ökológiainak* minősítjük.

A mondottakból következik, hogy a vizsgált *környezet* minden esetben *konkrét*; annak az élő szervezetnek, funkcionálásának a tere, amelyre hat, és az a tér, amely az illető élő szervezetre, ill. funkcionálására hat.

A legtágabb értelemben vett környezeten belül hierarchikus értelemben is a legkülönbözőbb *konkrét környezetek* léteznek, amelyek *térkategóriákként* törvényszerűen *úgy kapcsolódnak egymáshoz, keresztezik és szövik át egymást, mint konkrét „birtokosaik”, az adott élő szervezetek és ezek funkcionálásai, tevékenységformái*. A konkrét környezetek száma is annyi, amennyi a konkrét élő szervezetek száma, s minthogy a „birtokos” és „birtok” kölcsönkapcsolatai fűzik őket egymásba, ezek a kapcsolatok és *kölcsönhatások* pedig *időben és térben változóak*, s főként különböző intenzitásúak, ezért változnak a *konkrét környezetterek* is. S a dinamikus változások *rugója mindig társadalmi-gazdasági, ill. biológiai meghatározottságú*. (Ez természetesen nem jelenti, hogy a konkrét környezetterekben nem hatnak a geofolyamatok, s nem hoznak létre lényeges változásokat, de nem ezek a folyamatok teszik „konkrét környezetté” az adott teret.)

A fentiekből következik, hogy a környezet tartalmát természeti és társadalmi-gazdasági komponensek teszik ki, amelyek bizonyos szempontból (főleg metodikailag-didaktikailag) elkülöníthetően *rendszerezhetők*, de rendkívül szoros az egyes rész-, ill. alrendszerek közötti kölcsönkapcsolat, hatásmecha-



nizmus, s bármiféle kutatási, de főleg gyakorlati cél integrálást, ok-okozati előrelátást tételez fel.

A földrajzi táj fogalmának a környezettől való megkülönböztetése fő ismervének azt vélem, hogy nem viszonylat, nem „birtoka” egy élő szervezetnek, nem konkrét feltétele konkrét tevékenységnek, hanem a térnek olyan, a szomszédságtól a hierarchiai szintnek megfelelően többé-kevésbé elhatárolódó egysége, amely a természeti és – egyre inkább – antropogén folyamatok kölcsönhatására egyéni sajátosságokkal rendelkezik. Bár „*arculata*” a társadalom hatását, tevékenységét is tükrözi, ennek eredményeként is *nagymértékben formálódik, de térbeli alapja, határainak meghatározója a természeti tényezők összessége* (ami gyakran egy domináns tényező révén jut érvényre). Ezért fedi ritkán egymást területileg egy táj egy konkrét környezettel.

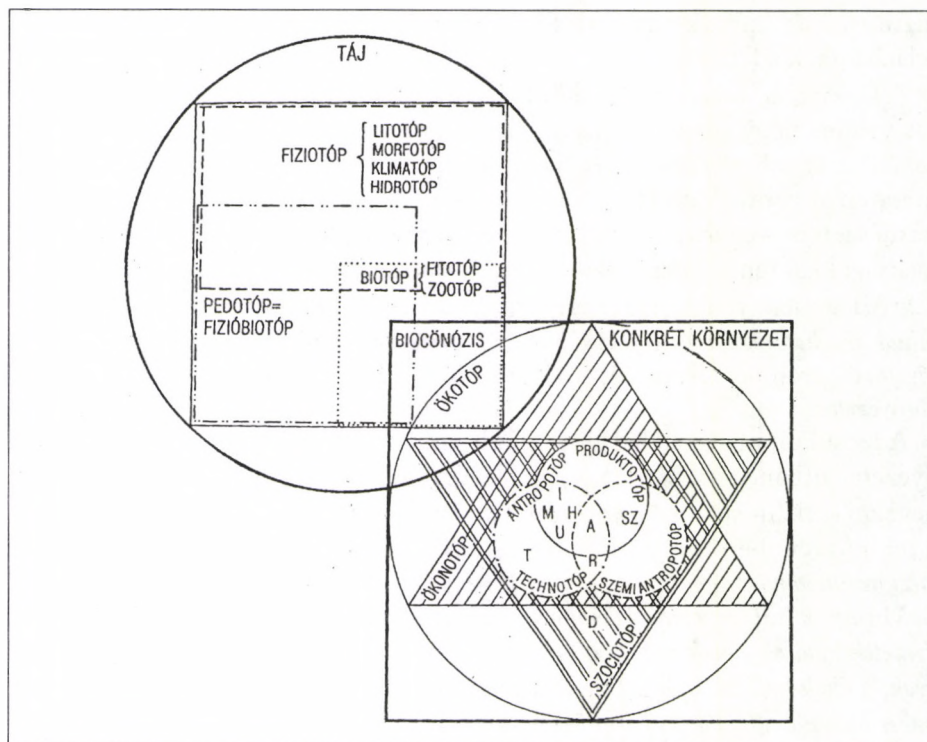
A fenti különbségtétel alapján feleslegessé válhat egy városi települési környezetet urbanogén, ill. városi tájnak, egy iparvidéket technogén tájnak stb. nevezni (urbán- stb. ökoszisztémáról persze beszélhetünk). Hiszen a tájak hierarchikus rendben és egymás mellett sorakozva lefedik az egész földfelszínt, és földrajzi nevük van.

Míg az emberhez, a társadalomhoz és tevékenységformáihoz kapcsolódó konkrét környezetek határai – ezek mozgásait követve – időben és térben meglehetősen változékonyak, a tájak határai – jórészt természeti meghatározottságuk miatt – állandóbbak. Az ember anélkül változtatja – igen jelentős mértékben is – a tájak képét, hogy határaikat változtatná; erre csak a legnagyobb szabású természetátalakítások vezethetnek.

Nem minden „konkrét környezet” regionális földrajzi egység. A „kölcsönhatás” és „feltételezettség” relációban a regionális egységen kívüli terek („exklávék”) is kapcsolódnak adott környezetekhez, a termelés, a kereskedelem, a forgalom, ill. a fogyasztás révén is (távolabbi, ill. külső nyersanyag- és energiabázis, piac stb.).

Ezzel szemben minden táj chorológiai, regionális stb. földrajzi egység. A heterogenitás egy bizonyos szintjével már jellemzett kistájat s a magasabb taxonómiai egységeket a homogén helyek, a német szakirodalomból származó, nyelvünkben is meghonosodott szóval a „tóp”-ok csoportjai teszik össze (a geotopológia alap-egysége a geotóp); megfelelői az orosz nyelvű szakirodalomban a *fáciesek*. A konkrét környezetek alapegységeinek pedig az *ökotópokat* tekinthetjük. Ez szemléleti kérdés; a térben természetesen együtt vannak jelen.

Mellékesen jegyzem meg, hogy a fenti eszmefuttatást tükröző és itt is bemutatásra kerülő, halmazrendszerű 2. ábrámon illusztrált komplex modell beépült Zonneveldnek a Nemzetközi Földrajzi Unió Táj szintézis Munkacsoportja 1981. évi konferenciájáról közzétett összefoglaló, a szemléletformálást szolgáló és a további kutatásokat orientáló anyagába, kötetébe (Tózsá I. 1984).



2. ábra. Topológiai alapegységek és kapcsolataik vázlatosan. A biocönózis a biotóphoz elválaszthatatlanul kapcsolódóan a geotópot és összetevőit ökotóppá teszi. A szocio- és/vagy ökonotópokhoz kapcsolódó társadalmi-gazdasági tevékenység a természeti helyet (geotópot és összetevőit) ökotóppá (pl. agroökotóp) avatja. A topológiai egységek és a belőlük felépülő nagyobb terek (tájak és konkrét környezetek) területileg fedhetik is, de határaik alapján át- meg át is szőhetik egymást. Rövidítések: M=montanotóp; I=indusztriotóp; H=hidrotechnotóp; T=transzportotóp; A=agrotóp; SZ=szilvano-  
tóp; R=rekreációtóp; U=urbanotóp; D=demotóp

A továbbiakban – szemelvényszerve – diákon mutatom be, igen vázlatosan, különböző hierarchiai szinteken, egységekben a speciális táj kutatási eredményeket. Előbb kis történeti visszpillantás az alapokra, majd a mondottak elvi-módszertani illusztrálása, a „példatár”.<sup>1</sup>

1 A székfoglaló előadáson diavetítés során bemutatott illusztrációkat, tematikus térképsorozatot itt kény-  
szerűségből mellőzve, a továbbiakban csupán néhány összefoglaló következtetésre, „narrátori” megjegyzésre  
szorítkozhatunk.



## Az alkalmazhatóságot szolgáló tájértékelési irányzat

Az említett természetföldrajzi *tájértékelési irányzatunkat* már 1963-ban olyan új, *alkalmazott földrajzi diszciplínának* tekintettük, ill. szántuk, amelynek *tárgya* a táj természetföldrajzi tényezőinek komplex ismerete alapján a gazdálkodást befolyásoló kedvező vagy kedvezőtlen adottságoknak mint a táj potenciáljainak összefoglalása, a gazdálkodás, a társadalom számára előnyös vagy előnytelen természeti adottságok feltárása, konstatálása és értékelése. Ezzel a táj kutatás társadalom- és gazdaságcentrikus, ökológiai szemléletű irányzatával a nemzetközi, főleg német tájökológiai kutatások is gazdagodtak, miközben a kutatás feltárandó homogén területi alapegységeként – a tájökológia „ökotóp”-ját tartalmában is kibővítvé – az „ökopottíp”-et (ökológiai *potenciál típus*) határoztuk meg. Az 1. ábrán a természeti szféra összetevői mint természeti adottságok, ill. a társadalmi-gazdasági nézőpontból mint természeti feltételek szerepelnek, s blokkonként csoportosítva és egyenként, tényezőnként, ill. ágazatonként is mindkét szféra szemszögéből áttekinthetők a kapcsolatok.

Ez az 1963-ban már publikált összefüggés-hálózati sémám tulajdonképpen a geoszféra rendszerét (az 1. ábrán a felső téglalapsor) mint „kínálati” oldalt ütközteti a társadalmi-gazdasági szféra rendszerének (az 1. ábrán az alsó téglalapsor) „keresleti” oldalával.

## Alap- és alkalmazott táj kutatások különböző hierarchiai egységekben

A táj kutatások a különböző táj kategóriákban, a „lépték”-nek megfelelően és a céltól irányítottan persze eltérőek lehetnek, *főként mélységükben és részletességükben*. Nagy-, közép- és kistájszintű tájértékelésekre, a *topológiai dimenzióban végzett igen részletes kutatásokra* kerülhet sor.

A megfogalmazott elvek és módszerek egyik első gyakorlati megvalósítását középtájszinten magam végeztem el Belső-Somogyról (1965), majd elengedhetetlenné vált megvalósítása (nagytajszinten elsőként Somogyi S. (1967) munkájaként az Alföldről) a nagyszabású, kollektív összefogással, Pécsi M. irányításával, Ádám L., Marosi S., Szilárd J. szerkesztésében, kutatóintézeti és egyetemi, földrajzi és rokontudományi szakemberek közreműködésével a hatvanas évek második felétől megjelentetett *Magyarország tájföldrajza* című monográfiasorozat köteteiben.

Ezekben az egyes *nagytajak* földtani adottságait, ősföldrajzát, ásványi nyersanyagait, majd az egymással kölcsönhatásban lévő domborzat, éghajlat, vízrajz, növényzet és talajtakaró fejlődését, jelen állapotát, főbb jellemzőit és várható



alakulását bemutatta, sort kerítettünk a közép-, részben a kistájak, az egyes tájtípusok elkülönítésére, tájalkotó tényezők területi sajátosságainak, különbségeinek bemutatására, különös figyelemmel a potenciális erőforrások, táji adottságok környezetkárosítás nélküli *hasznosítási lehetőségeire*.

A nagy- és középtájak, tájtípusok között és mellett *sajátos adottságainál* fogva egyedi feldolgozást, értékelést igényel a *Balaton térsége*, főként mint üdülőkörzet, a rekreáció konkrét környezete.

Emellett – más határok között – *középtájja avatja* egyetlen domináns tényező, a funkcióját megalapozó *tó*. Annak ellenére, hogy – a két nagytáj, a Dunántúli-dombság és a Dunántúli-középhegység határsávjában húzódva, sőt a Mezőföld révén egy sávot az Alföld szegélyéből is „sajátjává” téve – egyéb természeti adottságai révén meglehetősen heterogén, sajátos jellege miatt önálló, *komplex értékelést érdemelt*. Már a hetvenes évektől a Balaton környéki chorológiai és topológiai egységek, típusok jellemzésén kívül *ütköztettük a természeti ökológiai „kínálatot” a társadalmi-gazdasági „kereslettel”*. Kiemelten került sor a természeti környezetpotenciál integrált értékelésére idegenforgalmi–üdülési szempontból; az üdülőkörzet idegenforgalmának, az antropogén tevékenység előnyös és káros hatásainak térben és időben változó bemutatására, sajátos földrajzi aspektusoknak a környezeti terheléssel és környezetvédelemmel való összefüggésére; a tájtípusok elemzésére és összefoglaló értékelésére, a fejlesztési, meliorációs lehetőségekre a regionális rendezés szolgálatában.

Publikációk sorában foglalt kutatási eredményeim közül csak néhányra utalok, mellőzve pl. a tó kialakulására, a tóköznyék fejlődéstörténetére stb. vonatkozó alapkutatási eredményeket, alternatív területhasznosítási, környezetvédelmi javaslataimat: 1965 óta többször javasoltam a *Kis-Balaton* egy részének visszaállítását, természetes derítómezencévé alakítását a Keszthelyi-öböl feliszapolódásának, a tó terhelése csökkentésének érdekében; emellett egyéb beömlő patakok mentén *derítómezencék* kialakítását, a vízgyűjtő rendezését, szigorú talajvédő mezőgazdálkodás kialakítását, a tápanyag-terhelés csökkentését. Több, részben szakvéleménybe foglalt javaslatom – közvetlenül vagy közvetve – a *regionális rendezési tervbe* épült, területek védetté nyilvánításához vezetett.

A tó kritikus jövője szempontjából alapvetőnek ítéltam a *különböző érdekek* ütköztetését és az objektíve meglévő érdekellentétek feloldását. *Esetenként* – hangoztattam – *nincs alternatíva: az egyik érdeknek háttérbe kell szorulnia*. Ezt a tó funkcióját biztosító vízminőség javítása és a vízgyűjtőn folytatott mezőgazdasági termelés mint terhelő veszélyforrás összevetésével az alábbi példán érzékeltettem:

Figyelembe kell vennünk, hogy a mezőgazdasági termelés *hozadékát* itt tulajdonképpen csökkenti az a *makrogazdasági szintű*, az összehasonlításban



ráfördításként számba vehető terhelés, ami a vízgűjtőn folytatott agrártevékenység kémikáliái révén a tó vízminőségét veszélyezteti. A bruttó mezőgazdasági termelési értékeket növelő növényvédő szerek, műtrágyák stb. ilyen relációban nyilván lényegesen alacsonyabb szinten már csökkenő hozadékhoz vezetnek. Ez persze térben, üzemenként nagyon változatos lehet. Megállapításához természet- és közgazdasági vizsgálatok, gazdaságossági számítások együttesen szükségesek. Mindehhez természetesen figyelembe kell venni a tervezett egyéb környezetvédelmi beavatkozásokat, beruházásokat, műtárgyakat és költséghatásaikat is. Bármennyire korunk fő kérdései közé tartozik az élelmi-szer-probléma is, ebben a sajátos térségben csak a tavat nem veszélyeztető, differenciált, az erózió elleni védelmet is biztosító, megfelelő agrotechnikát alkalmazó, körültekintő, érdekegyeztetett termelés folytatható (Marosi S. 1980).

## Részletes tájtipológiai és topológiai vizsgálatok

Már a hatvanas években komplex részletes topológiai vizsgálatokat indítottunk el (Jakucs P., Marosi S., Szilárd J., Papp S.). A mikroklimatológiai észlelésekkel kiegészített ökológiai vizsgálatok kiterjedtek geomorfológiai felvételezésekre, térképezésre, litológiai és talajvizsgálatokra, vízföldrajzi adatgyűjtésre, a növénytakaró felvételezésére, s valamennyi ökológiai tényező komplex értékelésével kapcsolódtak egybe.

Célszerűen megválasztott tájtipusokra koncentrálva, mintaterületekhez kapcsolódva, az elért eredmények reprezentatív jelleget öltöttek, hasonló terület-típusokra általánosíthatókká váltak, s jól szolgálták chorológiai (táj-) kutatásaink céljait is. A mintaterületek között síksági (ezen belül ártéri, homok- és löszfelszín), domb- (különböző irányú völgyek különböző kitettségű lejtői és allúviumai) és hegyvidéki (tetők, különböző kitettségű lejtők), ezen belül eltérő természetes vagy kultúrnövényzetű, különböző litológiai felépítésű és talajú, hő- és vízháztartású mikroterek voltak. Gyakori célkitűzésünk volt horizontálisan és vertikálisan megmutatkozó mikroklimatikus sajátosságok, differenciák okainak elemzése, ennek során az ökológiai tényezők funkcionális értékelése, a domináns tényezők megállapítása.

Az ökológiai tényezők funkcionális értékelésével konkrét esetekben pl. megállapíthattam, hogy az ellentétes hatások mérlegelése rendkívül fontos. A tényezők adott esetben felerősíthetik egymás hatásait, de igen gyakran egymás ellen hatnak, csökkentik vagy meg is szüntethetik a másik tényező érvényre jutásának lehetőségeit. A cél: megtalálni a természetes ökológiai faktorokból összetevődő legkedvezőbb állapotot és a különböző tényezők feltárt hatásának és az érvényesülő törvényszerűségeknek az ismeretében a föld-(terület-)használatra, a művelés módjára



alternatív javaslatokat tenni. Hogy közülük adott esetben a gyakorlat mit fogad el, azt sok más szempont mellett végső fokon jórészt gazdaságossági tényezők (kereslet–kínálat, vagyis piaci szempontok) befolyásolják, amik önmagukban is időről időre változnak.

A mikroklimatológiai észlelések az *antropogén ökológiai hatások érzékelésére* is igen alkalmasnak bizonyultak. Az antropogén beavatkozás ökológiai vonatkozásban természetes ökotópok (biotópok) helyett *agroökotópokat stb. hoz létre*. Pl. növényzet nélküli, szántott felszíneken a természeti tényezők közül a domborzat, a litológiai felépítés, a talajvíz szintje és ezek együtthatásában is a talaj csak átüt hatásaiban az uralkodó és homogenizáló szerepet betöltő agrogén tényezőn (szántás, műtrágyázás, kemizálás stb.). A kultúrnövényzet állományklímái ugyancsak eltérő agroökológiai egységeket tükröznek (Marosi S. 1989).

A mikroklimatológiai mérésekkel és térképezéssel összekapcsolt ökológiai és tájértékelési irányzatokból fejlesztettük ki a hatvanas évek végétől az *agroökológiai irányzatot*. A részletes, experimentális reprezentatív típusterületi vizsgálatok tudományos egzaktságúak. Elvi és módszertani eredményeik mellett közvetlen gyakorlati, mezőgazdasági üzemekben megmutatkozó hasznuk abban is tükröződik, hogy mezőgazdasági üzemek megbízásából kezdtük el ezt a munkát talajtanosokkal (Stefanovits P., Kazó B.), majd Góczán L. és Szilárd J. munkatársaimmal, később Papp S. részvételével. Több mint 20 különböző adottságú (síksági – ezen belül pl. löszös, homokos, ártéri; erdő-, erdősztyep- vagy sztyeptalajok övezetébe eső –, dombsági, hegyláb felszíni stb.) *típus terület 1:2000–1:10 000 méretarányú komplex kutatására és térképezésére terjesztettük ki* sűrű helyszíni felvételezésekre, mérésekre és laboratóriumi elemzésekre épített vizsgálatainkat.

A színes térképsorozatok általában a következő tematikus térképeket, kartogramokat tartalmazták: geomorfológiai, lejtőkategória-, genetikai talajtérkép, humuszréteg-vastagság és humusztartalom, pH- és mészállapot-kartogram, a talajképző kőzetek (litológiai) és a talajok mechanikai összetételét tartalmazó kartogram, talajpusztulási térkép, tápanyagkartogram, vízgazdálkodási (lefolyási, vízáteresztési kartogram mesterséges esőztetés alapján), topo-, ill. mikroklimatológiai térkép; a javaslatkartogramok sorában a fentiek és a művelésági térkép figyelembevételével talajjavítási, talajművelési, tápanyag-utánpótlási, öntözési szaktanácsokat tartalmazó kartogramok; a tanulmánytervekhez a vizsgálati anyagokat tartalmazó táblázatok tömege és az értékeléseket, javaslatokat is magukba foglaló szöveges magyarázók is készültek.

A részletes felvételezés és térképezés alapján lehetőség nyílt a legkisebb *homogén agroökotópok körülhatárolására és tipizálására*, ami lehetővé teszi a mezőgazdasági üzemi táblák határainak s a táblákat elválasztó üzemi utaknak az öko-



lógiai adottságokhoz való igazítását s ezáltal egy-egy táblában a *homogén adottságok alapján a célszerű művelés, ezen belül az optimálisan termesztendő növény megválasztását, egységes agrotechnika, tápanyag-utánpótlás stb. alkalmazását.*

A munkának e potenciális gyakorlati hasznán kívül *geográfiailag feltárultak az ökológiai alapegységek, konkrétan a mezőgazdasági hasznosítással befolyásolt, antropogén hatást nagymértékben tükröző agroökotópok, amelyek összevonása generalizálásra, tipizálásra és mikrorégióális különbségek kimutatására adott lehetőséget, s előfutára volt a nyolcvanas években Láng I. által irányított nagyszabású, kiterjedt, szintetizáló, interdiszciplináris kutatómunkának, Magyarország agroökológiai potenciálja felmérésének.*

A tájértékelés, a tájtipizálás, a többé-kevésbé homogén téregységek elkülönítése eredményeként az is érthető következtetésként adódhat, hogy tulajdonképpen minden földdarab értéke jórészt *relatív*: egyrészt függ a hasznosítás módjától, s a cél a változó közgazdasági (piaci) szempontok figyelembevételével az alkalmasság (felhasználhatóság) alternatívái közül az optimális föld-(terület-)hasznosítási mód kiválasztása. Így a minősítés és értékelés is csak célorientált lehet. Másrészt azonos hasznosítás esetén különböző területek minősítése relatív értékkülönbségek minőségi kategóriák szerinti megállapítását teszi lehetővé.

A táj kutatások eredményeinek hasznosíthatósága természetesen csak lehetőség *mezőgazdasági szempontból* is, az agroökológiai potenciál felmérése révén. Ám a mezőgazdasági üzemek, gazdaságok termelési szintjei között mutatkozó különbségekben természetesen igen nagy szerepet játszanak egyéb gazdasági, technikai, szervezési, strukturális, munkaerő-, piaci stb. adottságok is. Ezek optimalizálása esetén sem célszerű azonban figyelmen kívül hagyni a természeti ökológiai adottságokat, sőt a fejlődéssel párhuzamosan egyre inkább célszerű azok felhasználását is optimalizálni.

## A földrajzi táj kutatások eredményei alkalmazhatóságának vázlatos összegzése

A táj kutatási eredmények alkalmazására tehát sokoldalú lehetőségek kínálkoznak:

A táj- és környezetértékelési irányzatok kimunkálása és továbbfejlesztése a természeti erőforrások, adottságok, ökológiai potenciálok regionális értékelésével, célszerű hasznosításával, a racionális területhasználattal, a környezetvédelemmel szemben támasztott igények kielégítését szolgálta és szolgálja.

Az elvi-módszertani eredményeket a földrajz és rokon tudományai Magyarország táj földrajzi feldolgozása során alkalmazták és hasznosították.

A *nagy tájszintű* feldolgozások a nemzetgazdasági és a területi tervezés tudományos megalapozását segítik elő, emellett fontos oktatási és közművelődési alapanyagok.

A *középtájszintű* feldolgozások eredményei közül pl. a Balaton környékiek a fentiekén kívül a regionális rendezési terv, a vízminőség-védelmi terv kimunkálását, a differenciált területhasználatot, arra érdemes területek védetté nyilvánítását segítették és segítik elő, kiegészülve pl. a tájtipológiai-ökológiai feldolgozásokat is megalapozó olyan munkálatokkal, amelyek a térség Pécsi M. irányításával elkészített geomorfológiai térképét, ill. a beépíthetőséget is figyelembe vevő-szolgáló mérnök-geomorfológiai térképsorozatot eredményezték (Juhász Á., Lovász Gy., Schweitzer F., Balogh J. stb.), hogy egyéb sajátos adottságú vagy típusú tájfeldolgozások tömegéről most – idő és tér szűkében – itt ne essék szó.

A nyolcvanas évek végére az országról felgyülemlett sokoldalú tájismeret, hatalmas adatmennyiség birtokában 10 geográfus és rokon tudományi szakember közreműködésével két testes kötetben megjelentethettük *Magyarország 230 kistájának kataszterét*, amelyben a fontosabb, főleg természeti környezeti tényezőket vettük számba. Az egyes kistájak helyzetének, területhasznosításának, domborzatának, földtani adottságainak, éghajlatának, vízrajzának, természetes és termesztett növényzetének rendszerezett bemutatását a tájtipológiai összegzés, hasznosíthatósági jellemzés zárja (Marosi S.–Somogyi S. 1990).

A szöveges jellemzés mellett adatok tömege biztosít többek között a terület-használat, tervezés stb. számára olyan áttekinthető igényű, rendszerezett mennyiségű információkat, amelyek elősegítik a természeti környezeti adottságok és erőforrások optimális figyelembevételét. A kistájkataszterben megjelentetett adattömeg – a szöveges értékelésen túl – már eddig is *alapja* volt számos, a regionalitás elvén felépülő, széles körű, ill. célorientált *adatbanknak*, *számítógépes tárolásra és továbbdolgozásra alkalmazták intézmények, tárcák, irányító szervezetek szakemberei*.

A domborzati térképezés, minősítés, egyéb környezetminősítés számtalan gyakorlati, alkalmazható eredménnyel járt és jár, pl. a *domborzati részpotenciál-értékelés* az ország kedvezőtlen adottságú, hátrányos helyzetben lévő, aprófalvas területeinek értékeléséhez, elmaradottságuk okainak feltárásához, e területek és településeik differenciált fejlesztési terveinek megalapozásához járult és járul hozzá.

A *topológiai dimenzióban* végzett kutatások, különösen az agroökológiai vizsgálatok eredményeit a feldolgozott területek mezőgazdasági üzei, gazdasági közvetlenül, pl. a hozamok jelentős emelkedésében megnyilvánulva is hasznosították és hasznosíthatják, különböző beruházások telephely-megvá-



- Marosi S. 1980.: *Táj kutatási irányzatok, tájértékelés, tájtipológiai eredmények különböző nagyságú és adottságú hazai típusú területeken.* Akad. doktori értekezés. Bp., MTA FKI, 119 p. Elmélet–Módszer–Gyakorlat 35.
- Marosi S. 1981.: Táj és környezet. *Landschaft und Umwelt. Földr. Ért.*, 30. 59–72.
- Marosi, S. 1989.: Geotopological Analysis of anthropogenic effects. *Geotopologická analyza antropogenních vlivů. Sborník prací*, 20. GGU CSAV, Brno, 19–31.
- Marosi, S.–Góczán, L.–Szilárd, J. 1975.: Fiziko-geograficeszkaja ocenka landsaftov i landsaftno-ekologiceszkije isszledovanija v Vengrii. In: *Geografiszki problemi na obkr, -zsavcsata szrede.* Szofija, Izd. B'ulgarszkaja Akad. na Naukite, 123–135.
- Marosi S.–Juhász Á.–Szilárd J. 1984.: Tájak és táj típusok a Balaton vízgyűjtőjén. In: *A Balaton kutatás újabb eredményei III.* Veszprém, VeAB, 7–105.
- Marosi, S.–Papp, S. 1978.: Landscape factors modified by agricultural activity. *Geographia Polonica*, 41. Warszawa, 73–80.
- Marosi S.–Papp S.–Szilárd J. 1973.: Mikroökológiai adatok Duna menti ártéri felszíntípusok elkülönítéséhez. *Földr. Ért.*, 22. 33–53.
- Marosi S.–Papp S.–Szilárd J. 1975.: *Dunántúli reprezentatív típusú területek agrogeológiai vizsgálatának összegező értékelése.* Bp., MTA FKI, 56 p. + 28 t. + 6 térk.
- Marosi, S.–Pécsi, M. 1979.: Arbeitsrichtungen der Landschaftsforschung in Ungarn. In: *Contemporary Geogr. and Integrated Landscape Research.* Bratislava, Slovak Acad. of Sci. 30–41.
- Marosi S.–Somogyi S. (szerk.) 1990.: *Magyarország kistájainak katasztere I–II.* Bp., MTA FKI, 1023 p.
- Marosi, S.–Szilárd J. 1962.: *Physisch-geographische Bedingungen des Wirtschaftslebens im Somogyer Hügelland.* Budapest–Balatonszabadi, Földr. Konferencia Kiadványa, VI/1–18 + 1–2.
- Marosi S.–Szilárd J. 1963.: A természeti földrajzi tájértékelés elvi–módszertani kérdéseiről. *Földr. Ért.*, 12. 393–417.
- Marosi, S.–Szilárd, J. 1973.: De l'évaluation physico-géographique de la région a la cartographie complexe géoécologique. In: *La region. Problemes théoriques et méthodologiques. V Colloque franco-hongrois de géographie.* Bp., 109–114.
- Marosi S.–Szilárd J. 1975.: Balaton menti táj típusok ökológiai jellemzése és értékelése. *Földr. Ért.*, 24. 439–477.
- Marosi S.–Szilárd J. 1979.: Somogyi táj típusok jellemzése és értékelése. *Földr. Ért.*, 28. 51–85.
- Marosi S.–Szilárd J. (szerk.) 1969: *A tiszai Alföld.* Bp., Akadémiai Kiadó, 381 p. + 1 térk. Magyarország táj földrajza 2.
- Marosi S.–Szilárd J. (szerk.) 1967: *A dunai Alföld.* Bp., Akadémiai Kiadó, 358 p. + 1 térk. Magyarország táj földrajza 1.
- Partsch, J. 1899.: *Die geographische Arbeit des 19. Jahrhunderts.* Breslau, Gottl.
- Partsch, J. 1916.: *Die Grenzen der Menschheit. 1. Die antike Oikumene.* Leipzig, Teubner
- Passarge, S. 1912.: Physiologische Morphologie. *Mitt. d. Geo. Ges. in Hamburg*, 133–337.
- Passarge, S. 1919.: *Die Grundlagen der Landschaftskunde.* Hamburg, 210 p.
- Peschel, O. 1865.: *Geschichte der Geographie bis A. v. Humboldt u. C. Ritter.* München.
- Pécsi M. 1972.: A környezet komplex kutatásának földrajzi problémái. *Földr. Közl.*, 20. (96) 127–132.
- Pécsi M. 1969.: A Balaton tágabb környékének geomorfológiai térképe. *Földr. Közl.*, 17. (93) 2. 101–112.
- Pécsi M. (szerk. biz. elnök) 1989.: *Magyarország Nemzeti Atlasza.* Bp., Kartogr. Váll., 395 p.

- Pécsi M.–Somogyi S. 1976.: Magyarország természeti földrajzi tájai és geomorfológiai körzetei. *Földr. Közl.*, 15. (91) 285–302.
- Pécsi M.–Somogyi S.–Jakucs P. 1972.: Magyarország tájtípusai. *Földr. Ért.*, 21. 5–11.
- Pécsi M.–Marosi S.–Szilárd J. (szerk.) 1958.: *Budapest természeti képe*. Bp., Akadémiai Kiadó, 744 p. + 7 térk.
- Pécsi M. (szerk.) 1959.: *Budapest természeti földrajza*. Bp., Akadémiai Kiadó, 416 p.
- Prinz Gy. 1936.: *Magyar földrajz, I. rész. Magyarország tájföldrajza*. Bp., Kir. Magy. Egyetemi Nyomda, 341 p.
- Ratzel, F. 1894–1895.: *Völkerkunde*. 2. Aufl. Leipzig–Wien, Bibl. Inst.
- Richter, H. 1967.: Naturräumliche Ordnung. *Wiss. Abh. Geogr. Ges. der DDR*, 5. 129–160.
- Ringier, M. 1951.: Zur Entwicklung der Landschaft um Schönen Werd. *Geogr. Helvetica*, 65–108.
- Schweitzer F.–Tiner T. (szerk.) 1996.: *Nagyberuházások és veszélyes hulladékok telephely-kiválasztásának földrajzi feltételrendszere*. Bp., MTA FKI, 180 p.
- Somogyi S. 1967.: Az Alföld tájértékelése. In: *A dunai Alföld*. Bp., Akadémiai Kiadó, 91–163. Magyarország tájföldrajza 1.
- Stefanovits P. 1963.: *Magyarország talajai*. II. kiad. Bp., Akadémiai Kiadó, 442 p.
- Supan, A. 1889.: *Spezialgeographie*. Petermanns Mitt., 153 p.
- Supan, A. 1896.: *Grundzüge der physischen Erdkunde*. Leipzig, Veit. IX. 706 p.
- Teleki P. 1917.: *A földrajzi gondolat története*. Bp., 231 p.
- Tózsza I. (összeáll.) 1984.: *Tájmodellek*. Bp., MTA FKI, 57 p. Földr. Dok. 8.
- Troll, C. 1939.: Luftbildplan und ökologische Bodenforschung. *Zeitschrift der Gesellschaft für Erdkunde zu Berlin*, Nr. 7/8. 297 p.
- Troll, C. 1950.: Die geographische Landschaft und ihre Erforschung. *Studium generale*, 3. 163–181.
- Vidal de la Blache, P. 1913.: Des caracteres distinctifs de la géographie. *Annales de Géogr.*, 289 p.
- Vidal de la Blache, P. 1927.: *Géographie universelle*. Direction de P. Vidal de la Blache et L. Gallois. Tom. 1–18. Paris, Colin 1927–1939.
- Zonneveld, J. I. S. 1979.: *Land evaluation and landscape science*. I.T.C. Textbook of Photo Interpretation. Vol. VII. ch. 4. 106 p.
- Zonneveld, J. I. S. 1983.: Some basic notions in geographical synthesis. *GeoJournal*, 7. 121–129.



Meskó Attila

az MTA rendes tagja

# KÖRNYEZETTUDOMÁNY, KÖRNYEZETI GEOFIZIKA

Elhangzott 1996. április 10-én

A környezettudomány még csak születőben van. Az már világosan látszik, hogy szinte minden klasszikus diszciplína ismeretanyagát fel kell használnia. A természettudományok közül a biológia és a földtudományok mellett támaszkodik a kémiára és a fizikára, de a műszaki tudományok és a társadalomtudományok több területére is. A jelenségek és folyamatok leírásában nélkülözhetetlen a matematika, a nagy tömegű adat kezelésében az informatika. Végül a különböző tudományágak mozaikjait egységbe kell foglalni annak érdekében, hogy környezetünkről teljes képet kapjunk, és állapotát az emberi élet számára továbbra is biztosítani tudjuk.

Az élet megőrzésében, továbbadásában és lehetőség szerinti javításában általában is rendkívüli fontosságú a tudomány szerepe. A tudomány nem valamilyen misztikus, különleges tevékenység. A józan ész kiterjesztése pontos megfigyelés, mérés, matematikai leírás révén, melynek célja a világ működésének megismerése. Bár elsődlegesen tudást, azaz ismereteket kívánunk szerezni, többnyire ezek fel is használhatók. A tudományos ismeretek alapján konstruált eszközök egyaránt használhatók jó és rossz célok megvalósítására. A történelem tanúsága szerint a tudomány eredményeit igen sokszor az emberiség általános jólétének növelése helyett hatalom és haszon szerzésére használták. Ebben ma sem látható lényeges javulás. Számos ország nemcsak atom-, de kémiai és biológiai fegyvereket is fejleszt. A rendelkezésre álló arsenállal a teljes emberiséget, sőt szinte a teljes bioszférát már többszörösen el lehet pusztítani. A gazdag országok már nemcsak a szegény – eufemizmussal „fejlődőnek”

nevezett – világ nyersanyagait, olcsó munkaerejét, de már génállományát is „hasznosítják”. Eközben évszázadok óta folyik a természet, környezetünk pusztítása és mérgezése.

Az egyre nyilvánvalóbban látszó bajokért sokan a tudományt teszik felelőssé. Mások úgy vélik: már eleget tudunk, pusztán ügyes menedzseléssel minden gond megoldható. Mindkét állításnak éppen az ellenkezője igaz. Nem a tudomány a felelős az egyre hatékonyabb fegyverekért, a profit növelésének egyre kifinomultabb módszereiért – melynek következménye egyes régiók, kontinensnyi területek lakosságának kilátástalan nyomora –, hanem gátlástalan, lelkiismeretlen felhasználói. Még jó szándékú emberek, csoportok részéről is gyakori a felelősség elhárítása. Megelégszenek azzal, hogy maguk szándékosan nem okoznak kárt. Ez azonban kevés. Fel kell hívni a figyelmet a megismert veszélyekre, gondolkodni kell, hogyan kerülhetők el a katasztrófák, és cselekvésre kell ösztönözni mindenkit, aki tehet valamit a kedvezőtlen események kivédése érdekében.

Gondjaink megoldásához több ismeretre van szükség. A világról keveset tudunk, és az eddigiehez hasonló „ügyes menedzselés” a gondokat csak fokozni fogja. Bár ellenvélemények sokasága is teret kap, egyre többen gondolják, hogy rossz úton haladunk. Az erőforrások kíméletlen és a profit maximalizálását egyetlen célnak tekintő kihasználása, mely a termelőtevékenységek kedvezőtlen következményei iránti közömbösséggel párosul, belátható közelségbe hozta a természeti környezet és ezzel az emberi élet feltételeinek pusztulását.

A székfoglalót emiatt annak szentelem, hogy rövid áttekintést adjak az emberiség és a tágabb értelemben vett környezet viszonyáról, a környezet megőrzésének fontosságáról. Végül a környezettudomány egy kis – de számomra különösen kedves – szeletével, a környezeti geofizikával foglalkozom. Néhány módszerét és egyik fontos feladatát, a földrengés-veszélyeztetettség meghatározását vázolom.

## Az emberiség és környezet viszonya (rövid történeti áttekintés)

Az emberiség történetének során mindig is függött a természettől. A függés kezdetben teljes kiszolgáltatottságot jelentett. Egy rövid időszakban az ipari forradalom sikerei, a tudomány és technika csodálatos alkotásai azt a benyomást keltették, hogy a kiszolgáltatottság megszüntethető, szinte bármi megtehető korlátozás nélkül. A 20. század végén azonban világossá vált, hogy a környezet állapota rövidesen az időközben hatmilliárdnyira növekedett emberiség legnagyobb problémája lesz. A kiszolgáltatottság megszüntethető vagy csökkenthető, de a függés nem.



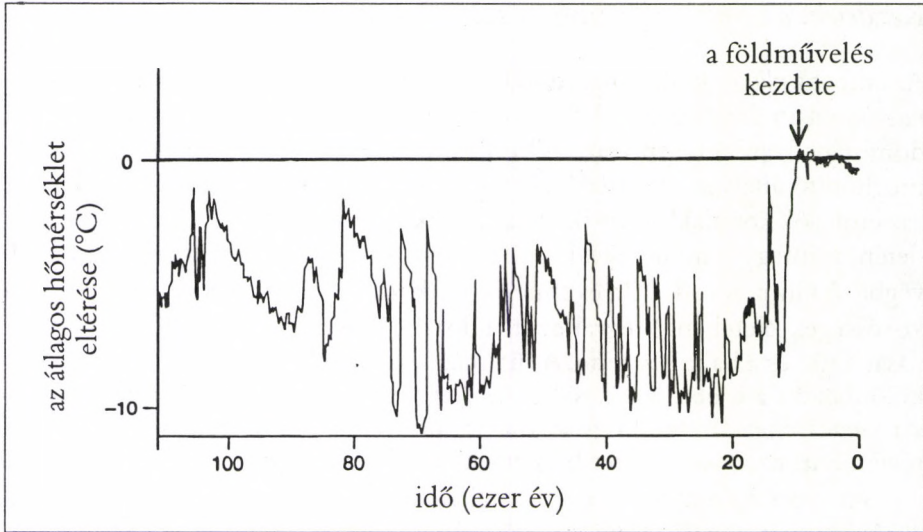
## *Kezdetek: az ember a környezet szülötte és felhasználója*

Az ember a *pliocén* korban fejlődött ki *hominida* őseiből, melyek az emlősök *kainozoikum*ban felvirágzó családjába tartoznak. A *kainozoikum*ban az állati élet domináns képviselői már az emlősök voltak, és gyors fejlődésüket, a világot meghódító általános elterjedésüket azzal is kifejezik, hogy a *kainozoikumot* „az emlősök korának” nevezik. A *kainozoikum* legvégén, azaz a *pleisztocén* kezdetén, mintegy 2 millió évvel ezelőtt lényeges környezeti változások mentek végbe. A klíma zorddá vált, és ennek következményei voltak a növény- és állatközösségek életében. Megváltozott a flóra és a fauna. Az ember életben maradását a tűz és a balta segítette. A tűz meghódítása előtt az ember nem sokban különbözött a többi ragadozótól. Az élete fenntartásához és továbbadásához szükséges energiát az elfogyasztott táplálék adta a szervezet metabolizmusa révén. E lassú folyamatban a hőmérséklet és az energiasűrűség alacsony. A tűz viszont gyors átalakulás. Az égés az éghető anyag napsugárzásból fotoszintézis révén szerzett kémiai energiáját szabadítja fel. A tűz nemcsak különböző táplálékokat tesz ízletesebbé vagy fogyaszthatóvá, de olyan mikroklimát is teremt, mely lehetővé teszi, hogy birtokosa életben maradjon zord, hideg vidéken is.

A legutóbbi évek tudományos vizsgálatai – elsősorban grönlandi mélyfúrásokból származó jég- és üledékminták analízise – mutatták, hogy a legutóbbi tíz-tizenegyezer év éghajlata különlegesen kedvezően alakult. A vizsgálható időszak nagyjából 110 ezer év volt. Ennek nagy részében az éghajlat gyorsan és szeszélyesen változott egy nagyon hideg és egy a maihoz képest közepesen hideg állapot között. Mintegy 20 nagy, globális változást lehetett meghatározni. Mindegyikük gyorsan, néhány évtized alatt zajlott le. Az utolsó, egészen napjainkig terjedő időszak nemcsak az előzőeknél enyhébb, de sokkal kisebb ingadozásokat mutató, stabil éghajlatot hozott. Ez adott lehetőséget arra, hogy érdemes legyen földműveléssel foglalkozni (1. ábra).

A földművelés megváltoztatta a táplálkozási és hidrológiai ciklusokat, de lehetővé tette a föld kizsárolását is, felgyorsítva az eróziót és a kiszáradást. A történelem előtti korban a rablógazdálkodás elég gyorsan elérte azt az állapotot, amikor az elpusztított környezetben további művelés már nem volt érdemes, és elvándorlásra kényszerítette a földműveseket. Voltak példák arra is, amikor éppen a helyes gazdálkodás hosszú ideig megővta a környezetet, és azonos helyen is biztosítani tudta az élet lehetőségét. Amikor azonban az egyensúly egy idő után minden erőfeszítés ellenére mégis megbomlott, a föld és a kultúra lehanyatlott, és együtt pusztult el.

A mezőgazdaság számára fontos volt az évszakok ismerete és előrejelzése, különösen azokon a tájakon, ahol a vetés és aratás időpontja kritikus. A Nap és



1. ábra. Az átlagos hőmérséklet (°C-ban) a jelenlegi hőmérséklethez viszonyítva az utóbbi mintegy 110 ezer évben. A meghatározások az oxigén-18- és oxigén-16-izotópok arányán alapszanak. Hidegebb klímában a nehezebb izotóp mennyisége kisebb. A minták a Grönlandot fedő jégpáncélon mélyített fúrásokból származtak. A klíma a jelenleginél hidegebb volt, gyakori gyors ingadozásokkal. A mezőgazdaság kezdete tökéletesen egybeesik a 11 ezer éve stabilizálódott kedvező klímával

a csillagok helyzete és mozgása alkalmasnak bizonyult az előrejelzésre, kifejlődött a csillagászat. Már Kr. e. 2700-ból részletes *asztronómiai* számításokról tudunk. A csillagászati elképzelések, majd a *kozmológiák* egy igen lényeges, ma is érvényes felismerésre utalnak: az ember és környezete csak egy hatalmas, szinte elképzelhetetlenül nagy és rendkívül bonyolult rendszer piciny eleme.

Már a késői *neolitikumban* egy új tényező lépett a föld és ember kapcsolatába: a fémek és a fémolvasztás fölfedezése. Őseink már a történelem előtti korban fölfedezték az első ércbányákat, és megtanulták, hogyan lehet a fémeket az ércből kivonni. Az ércbányák birtoklása jólétet és gazdagságot hozott. Ezért hosszú felfedezőutakat tettek, és a régészet tanúsága szerint az utak célja sokszor az ércet kutatása volt. Az építéshez és fazekassághoz kőre és agyagra is szükségük volt. Ezeket másutt találták meg. A sikerhez több kellett, mint az érc vagy a jól használható agyag pusztá felismerése. Meg kellett találni azt a környezetet is, ahol a keresett anyag egyáltalán előfordulhat. Megint más anyagokat használtak a festéshez, és ezek egy része is a földből származott. Az ásványok és közetek ismerete, mely előkészítette a *geológia* kialakulását, legalább tízezer éves



múltra tekint vissza. A mezőgazdaság mellett a bányászat a második ősi kapocs az emberiség és a föld között.

A természet pusztító erőit – a vulkánkitöréseket, földrengéseket, viharokat, az áradásokat és aszályokat, a klíma hosszú idejű romlását – már nagyon korán elszenvedte az emberek egy-egy csoportja. A katasztrófák hatása azonban csak akkor vált igazán jelentőssé, amikor az ipari forradalom során a nagy városokban sérülékeny infrastruktúra és nagy népsűrűség alakult ki. Csak egyetlen példa: az 1995 januári földrengés *Kobéban* (Japán) amellelt, hogy több mint 6000 emberéletet követelt, jóval több kárt okozott, mint hazánk egyévi nemzeti jövedelme.

### *Mezőgazdasági és ipari társadalmak*

A mezőgazdasági társadalmak lényegében a Nap energiáját hasznosították. A föld művelésével, teraszok kialakításával, később öntözéssel, növények és állatok nemesítésével, mások kiirtásával elérték, hogy azonos nagyságú terület sokkal több ember eltartására legyen képes, mint a gyűjtögetés és vadászat. A bioszféra „megművelt” része hatékonyabban hasznosította a Nap energiáját. A napsugárzás a forrása a szél és a víz energiájának is, mely szélmalomokat és vízimalmokat hajthat. Az erdők hosszabb időszak alatt halmozzák fel anyagukban a Naptól származó energiát. Az erdők kiirtásával gyorsan hozzá lehet jutni több száz év napsugárzásának tárolt energiájához – de csak egyszer. A mezőgazdasági társadalmak fejlődése elé áthághatatlan korlátot állított a rendelkezésre álló energiaáram véges nagysága.

Az ipari forradalom nem lett volna lehetséges a fosszilis energiahordozók felhasználása nélkül. A mezőgazdasági és ipari társadalmak közötti döntő különbség az, hogy a mezőgazdasági társadalmak közvetlenül a napenergiát hasznosítják, az ipari társadalmak a fosszilis napenergiát – a szenet, olajat és gázt – használják. A fosszilis energiahordozók szintén a Nap energiájának és a fotoszintézisnek köszönhetik létüket, melyet kedvező geológiai folyamatok, kedvező körülmények között, a föld mélyében számunkra megőriztek. Kialakulásukhoz évmilliókra volt szükség, felhasználásuk gyorsasága nem kevésbé rablógazdálkodás, mint az őserdők kivágása. A „föld alatti őserdők” meglévő készlete a kitermelés jelenlegi üteme mellett rövidebb ideig elegendő, mint az ipari társadalmak kialakulásához szükséges idő.

Az ipari forradalom 200 éves történetében ugyanúgy szerepe volt a fa hiánya miatt a szén kényszerű felhasználásnak, a gőzgépek, majd a belső égésű motorok feltalálásának, mint a hirtelen jött energiabőségnek – amit a fosszilis energiahordozók biztosítottak. De szerencsés geológiai véletlenek is szerepet ját-

szottak. A szén ismert volt a mezőgazdasági társadalmakban is, de csak végszükségben használták fel tüzelőanyagként a fa helyettesítésére. A vasolvasztásban is inkább faszenet alkalmaztak. 1 tonna nyersvas előállítására, majd finomítására nagyjából 50 köbméter fára van szükség. Ez pedig 10 hektárról termelhető ki. Az angol vasgyártás a 17. századtól a 18. század közepéig stagnált a faszén állandó hiánya miatt. A szén felhasználása döntő változást hozott. 1 tonna szén nagyjából 1 hektárról kitermelhető fa energiatartalmával azonos energiát ad. Az angol acéltermelést és az ehhez szükséges energiát biztosító (az egyre növekvő mennyiségben felhasznált szénrel azonos energiatartalmú) erdőterületet az 1. táblázat adja meg.

1. táblázat

*Az angol acéltermelés (kovácsoltvas-termelés) biztosításához szükséges erdőterület, feltételezve faszén használatát*

Éves átlag	Acéltermelés (1000 tonna)	Ekvivalens erdőterület (1000 km <sup>2</sup> )
1620	19	1,9
1690	23	2,3
1720	25	2,5
1781–1790	69	6,9
1800–1814	127	12,7
1820–1824	669	66,9
1850–1854	2716	271,6
1900–1904	8778	877,8

Mivel Anglia területe nagyjából 150 000 km<sup>2</sup>, nyilvánvaló, hogy a 19. század közepén már akkor sem lehetett volna ezt a mennyiséget előállítani, ha az egész országot erdő borította volna és minden egyes fából faszenet állítanak elő. Megjegyezzük, hogy a széntermelés az első világháború előtti utolsó békeévben, 1913-ban 287,4 millió tonna volt, és ez jóval nagyobb erdőterülettel egyenértékű, mint az ország teljes területének tizenötszöröse. Angliában azonban bőségesen volt szén – a Tyne völgyében a felszínen is –, és a nagyvárosokba vízi úton könnyen el is lehetett szállítani. A szerencsés geológiai és geográfiai adottságok valószínűleg döntő szerepet játszottak abban, hogy az ipari forradalom Angliából indult világhódító útjára. A Ruhr-vidéken vagy Sziléziában is van szén, de csak nehézkesen, szárazföldi úton lehetett szállítani, Olaszországban vagy Görögországban bármit lehetett vízi úton szállítani, de nincsen számottevő széntelep.



Az ipari társadalmakban szükség volt nyersanyagok és termékek gyakori és nagy tömegű szállítására. Ez a föld és ember között ismét új kapcsolatokat alakított ki. Csatornákat ástak, vasutat és utat építettek, megsokszorozódott a tengeri közlekedés. Még később, már századunkban a repülés a légkörnek és folyamatainak vizsgálatát tette életfontosságúvá, bár ennek csírái már a tengerhajózás idején megvoltak, hiszen a vitorlás közlekedés a szelek, óceáni áramlatok, partok, árapály mellett a szelek ismeretét is igényelte.

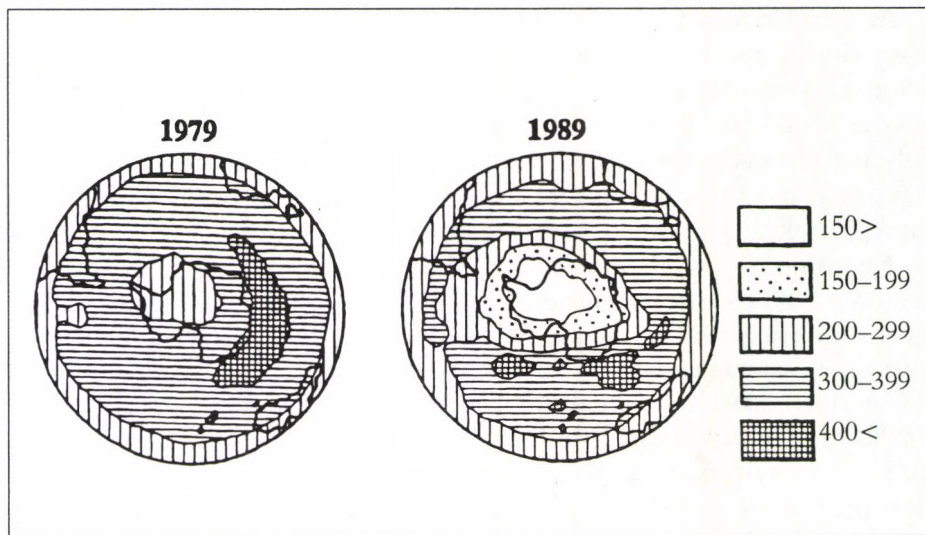
A kommunikáció kifejlődése, kezdetben a távíró, majd a telefon, rádió, televízió a Föld elektromos tulajdonságai iránti érdeklődést keltette fel, és nagyon fontossá tette az atmoszféra felső rétegeinek megismerését, az ionoszféra és magnetoszféra kutatását.

A modern ipari társadalmak fejlődésében a nyersanyagok, a szállítás és hírközlés egyaránt lényegesek. Amikor az ipari társadalmak gyarmatbirodalmakat építettek ki, a nyersanyagforrások világméretű kutatása és kitermelése kezdődött meg. A 19. század közepétől azonban megszűnt a geográfiai expanzió lehetősége. Az emberiség rádöbrent a Föld véges méretére. Kevés birtokba vehető, művelésre alkalmas lakatlan földterület maradt. Új területek birtokbavétele helyett már csak elfoglalt területeket lehetett valakitől elvenni. Ez nemzeti és nemzetközi válságokhoz vezetett. Mivel a rablógazdálkodás évezredes beidegződése megmaradt, az újrafelosztást lokális háborúkkal, majd a 20. században világháborúkkal próbálták kierőszakolni, mérhetetlen szenvedést okozva százmillióknak.

### *A környezet jelenlegi állapota*

A népesség az utóbbi 200 évben csak megnyolcszorozódott, de az ipari termelés a két évszázaddal ezelőttinek legalább a százszorosára nőtt. A világ vízfogyasztása alig száz év alatt tizenötször nagyobbá vált. Közben mintegy hetven ezer új vegyi anyagot állítottak elő, amelyek bejutottak a levegőbe, a vízbe és a talajba. Ezek egy része mérgező, és az élővilág számára teljesen ismeretlen, emiatt az alkalmazkodásnak még az esélye sincsen meg. Más részük ugyan nem mérgező – ilyenek például a freonok (halogénezett szénhidrogének) –, de más, kedvezőtlen hatásuk ugyanolyan pusztító lehet. A sztratoszférába feljutó freonok katalizálják az ózon lebontását, az ózonburok elvékonyodása pedig – most még csak a sarkok felett és nagyobb szélességeknél, de egyre növekvő kiterjedésben – egyre több ibolyántúli sugarat enged lejutni a tengerszintre. A változás gyorsaságát illusztrálja a 2. ábra.

A világ trópusi őserdőiből évente két magyarországnyi területet irtanak ki, s arra lehet számítani, hogy a zárt trópusi erdők a jövő század első felében eltűn-

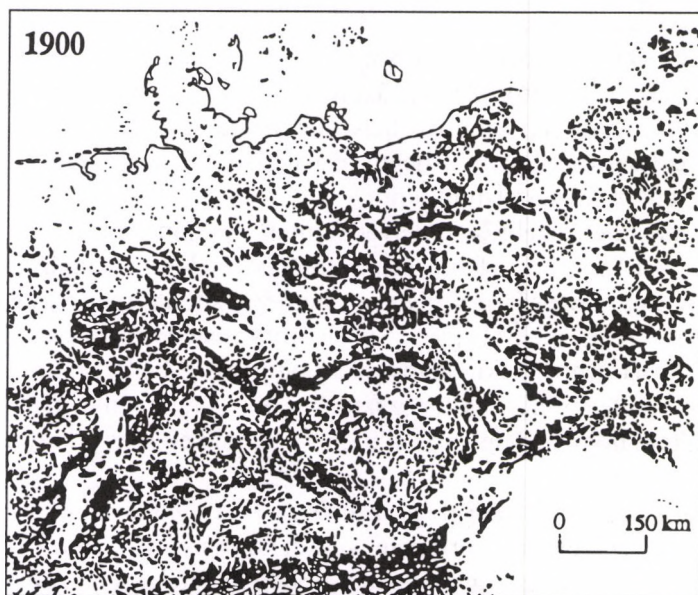
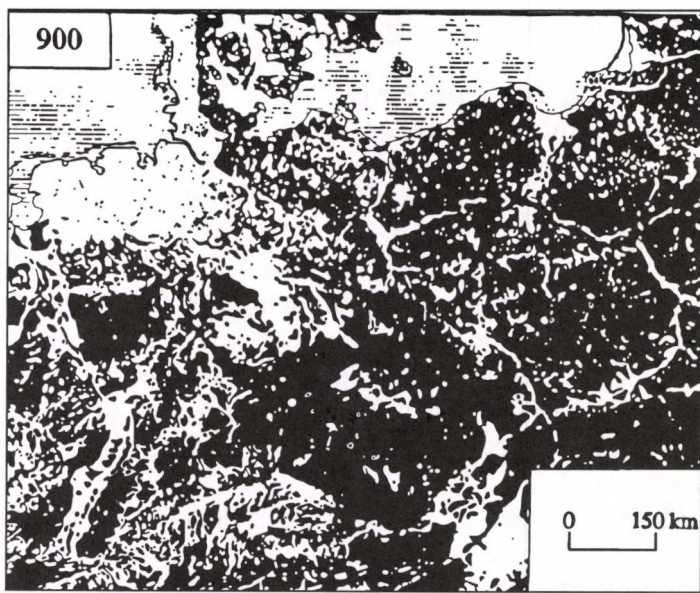


2. ábra. Az ózon koncentrációja (Dobson-egységekben mérve) a sztratoszférában az antarktiszi tavasz (október) kezdetén 1979-ben és 1989-ben

nek a térképről. Európa erdőit két évezred, az Egyesült Államok erdőit néhány évszázad alatt tarolták le (3. ábra). A folyamat napjainkra felgyorsult. A kéntartalmú szenek elégetése és más ipari folyamatok a földi és vízi ökológiai rendszerek savasodását okozzák. Az erdőirtás és a nem körültekintő mezőgazdasági művelés talajvesztéssel vagy legalábbis talajdegradációval jár: sivatagosodás, a nem megfelelő öntözés miatt szikesedés csökkenti a termőképességet. A szennyeződés és a veszélyes hulladékok gondatlan elhelyezése és balesetek miatti mérgezés ijesztő méreteket ölt. A természet tűrőképességének határára jutottunk, és ez előbb-utóbb az életminőség romlásához, a nemzetek közötti ellentétek kiéleződéséhez vezet.

Az ENSZ „Környezet és fejlődés” világkonferenciáján, amelyet 1992. június 3. és 14. között Rio de Janeiróban tartottak, 173 nemzet képviselői elfogadták a 21. századra vonatkozó „Agenda 21” akciótervet. Bár a kormányfők által aláírt megállapodások, kötelezettségvállalások a várakozásoknak nem feleltek meg, de a világ figyelmét a megoldandó és részletesebben vizsgálendő környezeti problémákra irányították. Világossá tették, hogy összehangolt nemzetközi intézkedésekre van szükség, a fenyegető folyamatok csak így előzhetőek meg, illetve csak így mérsékelhetők. A környezeti ártalmak és veszélyek nem ismerik az országhatárokat.





3. ábra. Erdővel borított területek  
(feketével jelölve)  
Közép-Európa területén 900 és 1900 között

## *Az ember és a Föld: átalakítás vagy megőrzés*

A környezet és az emberi létesítmények sebezhetősége olyan állapotot teremtett, amivel eddig még nem találkoztunk. Az új helyzetben különböző megoldások választhatók. Ezeket négy nagy csoportba sorolhatjuk.

Az első csoport támogatói a *technológia korlátlan fejlesztését* tartják kívánatosnak. Ez a megközelítés a „fejlődést” tartja az egyedül fontosnak, és nem vesz tudomást annak pusztító mellékhatásairól. Azzal igazolja magát, hogy eddig is volt fejlődés, és mellékhatásait valahogy mindig kezelni tudták. Ez a megközelítés a rablógazdálkodás modern formája. Képviselői szívesen elfelejtik, hogy bár eszközeink fejlődése a múltban valóban sok eredményt hozott, de éppen elhanyagolt mellékhatásainak felhalmozódása okozza napjaink gondjait. A mellékhatások ma már sokszor többet nyomnak a latban, mint a fejlődés pozitív következményei.

A második megközelítésben még mindig a fejlődés volt a központi cél, de káros mellékhatásait tervezéssel, a szociális és kulturális szükségletek figyelembe vételével kísérelték meg csökkenteni. Ezt a megközelítést alkalmazta például a Szovjetunió és Kína. Kezdetben valóban sikerült a fejlődés ütemét gyorsítani. Az ipari termelés növekedése kezdetben „az ember legyőzi a természetet” jelszavát is hihetővé tette a gyanútlan tömegek számára. A természetátalakítási tervek egy jelentős részéről azonban kiderült, hogy gazdasági hasznot alig hoz, a természetben azonban helyrehozhatatlan pusztítást okoz. A végeredmény is közismert: szinte megtisztíthatatlanul elszennyezett környezet, csökkenő életkor, kilátástalan nyomor.

A harmadik megközelítés – melyet szintén gyakran hallunk manapság – minden beavatkozás azonnali megszüntetését követeli. Oka a jogos aggodalom és félelem, de ez a szélsőséges álláspont nem valósítható meg a gyakorlatban, mert a természet „békében hagyása” az élet minőségének azonnali, drasztikus romlásával járna. Annak, aki villanyt akar gyűjtani, el kell viselnie erőművek létét. Remélhetőleg mindig csak egy szűk kisebbség véleménye marad. Különböző is kétséges, hogy meg lehetne állítani a műszaki előrehaladást, még akkor is, ha az előnyös volna.

Az általam helyesnek vélt megközelítés „*a Föld a mi kertünk*” vezérelvben foglalható össze. Gyökerei a történelem előtti korra nyúlnak vissza, összegezve a gondolkodó emberiség hagyományait. Ebben az értelemben modern változata a megvédő, megőrző gazdálkodásnak. Ellentétes a rablógazdálkodással. Például a földművelésben ez azt jelenti, hogy folyamatos figyelemmel és talajjavítással igyekezhetünk növelni a termelést, de ez nem mehet sem a termőtalaj, sem a nem megművelt földek rovására. Az ipar az olcsóbb termelés és



nagyobb nyereség érdekében nem szennyezheti a levegőt, a vizet és a talajt toxikus gázokkal, mérgekkel, nehézfémekkel – rontva ezzel a környezetben élők életminőségét és veszélyeztetve egészségét. Az energiatermelés fontos, de nem károsíthatja az ivóvízellátást, vagy nem okozhat radioaktív szennyeződést.

### *A környezet állapota Magyarországon*

A szennyező források és veszélyek térbeli eloszlása az utóbbi években módosult. Már nemcsak néhány ipari körzetre összpontosul, hanem sokkal szélesebb területre is kiterjed. Ez nem változtat azon, hogy az ipari körzetekben át kell térni környezetbarát technológiákra, hiszen ebben is súlyos adósságaink vannak. De az ipar mellett jelentős szennyezőforrás a mezőgazdaság és a közlekedés is. Megjelent a környezetszennyezés importja, nemcsak közvetlenül: ideszállított hulladék formájában, de közvetve is: környezetszennyező tevékenységek áttelepítésével. Súlyos gondjaink vannak a levegővel, vízzel és talajjal, sőt már a mélyebb kőzetrétegekkel is.

A levegőszennyezés mértékét mutatja, hogy az ország területének néhány százaléka súlyosan, mintegy tizede mérsékelten szennyezett. A rendszeresen vizsgált 90 település közül 24 minősül „szennyezettnek”, 51 pedig „mérsékelten szennyezettnek”, és csak 15 kapott „megfelelő” minősítést.

A kén-dioxid-szennyezettség a legnagyobb Tatabánya, Dorog, Miskolc, Ózd, Kazincbarcika térségében, átlagban 50–70 mikrogramm/köbméter között.

A nitrogén-dioxid-szennyezettség sorrendje: Pécs, Győr, Dorog, Eger, Komló, átlagban 50–70 mikrogramm/köbméter között.

Az üledő por mennyisége legnagyobb Dunaújváros, Kecskemét, Tatabánya, Vác és Várpalota térségében, meghaladva az 50 mikrogramm/köbméter értéket.

Magyarország vízgazdálkodási adottságait alapvetően meghatározza, hogy a vízfolyások többsége az ország határain kívül ered. A folyók vízhozama, vízminősége, az árvízi veszélyeztetettség mértéke a természeti tényezőkön kívül a felvizi országok vízgazdálkodásától és területhasználatától függ. Kiszolgáltatott állapotunkat jól jellemzi, hogy a felszíni vízkészletek 95%-a külföldről érkezik.

A szeszélyesen változó csapadékmennyiség miatt az ország aszálytól (vízhiánnyal), ugyanakkor árvizektől és belvizektől egyaránt veszélyeztetett. Még nagyobb folyóink esetén sem ritka a maximális és minimális vízmennyiségek közötti több mint egy nagyságrend különbség. (Például a Duna Budapestnél tapasztalt minimális vízmennyisége  $580 \text{ m}^3/\text{s}$ , a maximum  $8600 \text{ m}^3/\text{s}$ , a Tisza esetében ugyanezek az adatok Szolnokonál minimum:  $60 \text{ m}^3/\text{s}$ , maximum:  $3820 \text{ m}^3/\text{s}$ , Szegednél minimum:  $95 \text{ m}^3/\text{s}$ , maximum:  $4700 \text{ m}^3/\text{s}$ .) Nagyobb árvíz esetén Magyarország 52%-a veszélyeztetett, negyede a mértékadó árszint

alá esik, ahol mintegy 2,5 millió ember él. A kisvíz-folyások hossza dombvidéken összesen mintegy 35 000 km, 1500 települést több mint 1800 kisebb vízfolyás keresztez. Az árvízveszélyes területek 97%-a mentesített, de a szükséges méretre csak a művek fele épült ki. A belvízcsatorna-rendszer a felesleges vizek 15 nap alatti eltávolítására képes. Mind az árvízvédelem, mind a belvízvédelem területén aggasztó, hogy a fenntartási munkák tartós elmaradása miatt a védelmi képesség egyre romlik, az előntések valószínűsége évről évre nagyobb.

A nagy tavak – Balaton, Velencei-tó, Fertő tó, Tisza-tó – vízminőségének védelme több éves, az egész vízgyűjtőre kiterjedő komplex vízgazdálkodási fejlesztési programok végrehajtását igényli. A folyók szabályozása során keletkezett holtágak jelentősen előregeredtek, elszennyeződtek.

Az ivóvíz nagy része, közelítőleg 90%-a felszín alatti vízbázisból származik. A vízellátó művek kétharmada sérülékeny földtani környezetből termeli a vizet, ahol fennáll a szennyezés veszélye. Ilyenek például a főváros parti szűrő-sű vízbázisai. Országsszerte szaporodnak azok az esetek, amikor jelentős többletköltséggel járó tisztítóberendezéseket kell építeni, vagy az elszennyeződött vízbázist használaton kívül kell helyezni.

A lakosság többségének van vezetékes vízellátása. A hálózatra kapcsolt lakások ellátottsága közel 90%-os. A csatornázás helyzete lényegesen rosszabb, a csatornára kötött lakások aránya csak valamivel több mint 40%. A két érték közötti különbség, az úgynevezett közműhiány az 1980-as évektől egyre jobban kinyílt. A szennyvízkezelő program lelassult. Az összegyűjtött szennyvizek 55%-a tisztítás nélkül jut a befogadóba, és a tisztítás is csak mintegy harmadrészben felel meg az előírásoknak. Az ország több mint háromezer települése közül kevesebb mint ötszáz rendelkezik csatornahálózattal, még kevesebb szennyvíztisztító teleppel. A csatornázatlan területeken lévő közműpótló rendszereknek kevesebb mint 10%-a működik elfogadhatóan.

Az ipari vízszükségletek 50%-át a felszíni vizekből saját víztermeléssel biztosítják. Ennek jelentős része hűtővíz. Az ipari frissvíz-felhasználás ennek ellenére messze meghaladja a kommunális vízfelhasználást.

Mezőgazdasági vízhasznosítás (öntözés) csak a megművelt terület mintegy 5%-án folyik. A vízszolgáltató főművek kapacitása kihasználatlan. A Duna–Tisza közén a talajvízszint jelentősen, helyenként 6- méterrel csökkent. A nem megfelelő öntözés miatt mintegy 10 ezer négyzetkilométer nagyságú területet elsisvatagosodás fenyeget.

Az országban évente 100 millió tonnát is meghaladó mennyiségű, fejenként több mint 10 tonna hulladék keletkezik. A települési szilárd hulladék mennyisége évente átlagosan 2-3%-kal nő. Az ártalmatlanítás mintegy 85%-ban lerakással történik, de a mintegy 2700 ismert lerakóhelynek csupán 30%-a felel



meg az előírásoknak. A csatornázatlanul élő lakosságnál közel évi 100 millió köbméter települési folyékony hulladék keletkezik. Ennek 90%-a elszikkad a tározók helytelen kialakítása miatt. A termelési szférában keletkezett folyékony hulladékkal együtt jelenleg évi 20 millió köbméter kezelésére van lehetőség (kevesebb mint 20%).

Az évente keletkező veszélyes hulladék mennyisége mintegy 2,5 millió tonna. Ennek 30%-a égethető el, a többi fizikai-kémiai-biológiai ártalmatlanítást igényel. Szükség volna szakszerű lerakásra és új telephelyek kialakítására. Meg kellene oldani az üzemek saját lerakóhelyein tárolt veszélyes hulladékok kezelését. Kiemelendő a meddőhányók problémája. Mintegy 3500 meddőhányón összesen 1 milliárd tonna kezelendő anyag halmozódott fel. A kis és közepes aktivitású radioaktív hulladékok elhelyezésének gondja az előkészítésre fordított jelentős összegek ellenére sem megoldott.

Az utóbbi évtizedben a környezetvédelmi szempontok háttérbe szorultak, a szükségesnél kevesebb a környezetvédelmi beruházás. Bár a nehézipar és mezőgazdaság termelésének visszaesése valamelyest csökkentette a környezetszennyezést, de növekedett a közlekedés miatti nitrogén-oxid-kibocsátás, a kommunális szemét és hulladék mennyisége. Több tízezerre tehető az egykori vagy ma is használt szennyezett telephelyek, létesítmények száma. A kármentesítés jelenlegi üteme mellett egy évszázad kellene a részleges megtisztításra, feltéve, hogy újabb szennyezés nem történik.

Nem vigasz számunkra, de objektíven meg kell állapítani, hogy sok ország küzd hasonló – esetenként enyhébb, másutt a mieinknél is sokkal súlyosabb – gondokkal. A környezet állapota globális probléma, a szinte reménytelen helyzetből csak hosszabb idő alatt, közös erőfeszítésekkel lehet kikerülni.

Válságok előfordultak a múltban is. Bár visszatekintve, ezek kevésbé súlyosnak látszhatnak, nem szabad elfelejteni, hogy korukban a megoldásukhoz rendelkezésre álló eszközök is korlátozottak voltak. Tény, hogy a válságok mélysége és gyakorisága az idővel növekedett, és az emberiség alighanem eddigi története legnagyobb kihívásával néz szembe, amikor a Föld mint globális rendszer romlását kell megakadályoznia. Mégis reménykednünk kell, hogy úrrá tudunk lenni a lassan már létünket fenyegető veszélyeken, melyek nagy részét önmagunknak köszönhetjük. A környezettudomány fontos eszköze a racionális cselekvés előkészítésének. Mivel a levegő, víz, talaj és kőzetek állapota, az ezekben a közegekben lezajló folyamatok és változások megismerése, leírása és előrejelzése nélkül nem cselekedhetünk, a környezettudomány a földtudományok eredményeinek felhasználását, módszereinek alkalmazását nem nélkülözheti. A földtudományok egyike, a geofizika is segíteni tud több fontos környezeti probléma megoldásában.

## Környezeti geofizika

A geofizikai mérések a földben lévő anyagok közötti fizikai különbségeket tudják kimutatni. Egy hulladéktárolóból szivárgó szennyezett, a porózus kőzetrétegben lassan áramló oldatnak más az elektromos ellenállása, mint az ugyanolyan mélységben és kőzetrétegben áramló tiszta talajvíznek. Veszélyes hulladékot tároló, elásott hordóknak más a mágnesezhetősége, mint a környező vagy fedő talajé. Fémhordóknak saját mágneses terük is van – míg a környező talajnak nincsen. De még az egyszerűen csak megbolygatott talaj szerkezete és több fizikai paramétere is megváltozik. Nemcsak természet alkotta üregek, de kiásott, majd betemetett árkok is megtalálhatók geofizikai mérésekkel – még akkor is, ha évszázadok alatt új rétegek kerülnek rájuk, és felszíni nyomaik a szem számára láthatatlanná válnak.

A rugalmas hullámok visszaverődnek különböző rétegek határáról, és így a rétegek helyzete meghatározható felszínen keltett és érzékelt szeizmikus hullámokkal. De ugyanígy viselkednek elektromágneses hullámok is, melyeket a földradar használ – bár sokkal sekélyebb rétegek, de sokkal jobb felbontású, részletesebb megismerésére.

Természetesen a geofizika csak egy a környezet védelmét segítő számos tudomány közül. Hasznosak lehetnek a légi felvételek, ugyanúgy, mint a talaj és a talajvíz kémiai analízise. Elengedhetetlen a geológiai és hidrogeológiai kutatás. Bizonyos feladatokban – például a földrengés-veszélyeztetettség meghatározásában – a szeizmológia mellett a geodéziai módszerekre is szükség van hosszú időtávú mozgások felderítésére, és pontos geológiai ismereteket igényel a veszélyes felszínig terjedő elmozdulásokat is létrehozni képes vetődések, az úgynevezett „capable fault”-ok nyomozása.

Példaként néhány geofizikai módszert mutatok be, és röviden vázolok egy komplex földtudományi feladatot, a földrengés-veszélyeztetettség meghatározását.

### *Egyenáramú elektromos mérések*

Bizonyos mértékig minden anyag, így a talaj és a kőzetek is vezetik az elektromos áramot. A vezetőképesség vagy – jobban ismert mennyiséget használva – annak reciproka, az elektromos ellenállás jelentősen függ a talaj szerkezetétől, a benne lévő pórusok méretétől és eloszlásától, az esetleges víztartalomtól és az abban oldott sók mennyiségétől, bár további, a felsoroltaknál kisebb jelentőségű tényezők is vannak. Igen kicsiny például az ellenállása – vagy ami ugyanezt jelenti: nagy a vezetőképessége – a nagy pórustérfogatú talajnak vagy laza



kőzetnek, amikor a pórusokat víz tölti ki. Kis mennyiségű oldott só ugyanis mindig van a talajvízben. Amikor a sótartalom az átlagosnál nagyobb, az ellenállás még kisebb. Ezen alapszik a mérés egyik fontos, környezetvédelmi felhasználása: hulladéktárolóból szivárgó szennyeződés felszín alatti mozgásának követése. A hulladéktárolóból, szigetelésének megsérülése esetén, ugyanis szinte mindig a normál talajvíz oldottsó-tartalmánál nagyobb koncentrációjú elektrolit szivárog. Lemérve a „gyanús” területen, néhány méterig terjedő mélységben az ellenállás eloszlását, a kis ellenállás alapján nyomon követhetjük a szivárgó anyag útját.

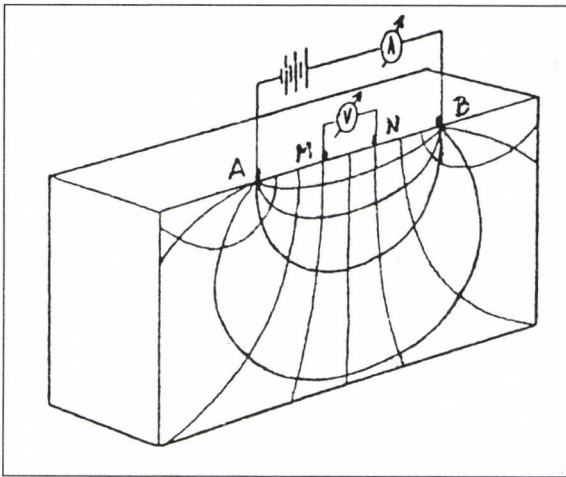
Néhány, a kutatás számára lényeges anyag fajlagos ellenállását a 2. táblázatban adjuk meg. (A fajlagos ellenállás egysége az  $\Omega\text{m}$ =ohmméter.)

2. táblázat

*Néhány, a gyakorlatban fontos kőzet fajlagos ellenállása*

Nagy fajlagos ellenállású kőzetek	Ellenállás ( $\Omega\text{m}$ )
Gránit	200–10 000
Bazalt	200–10 000
Andezit	200–10 000
Gneisz	200–10 000
Mészkö	100–5000
Dolomit	100–5000
Kis fajlagos ellenállású kőzetek	
Grafit	0,001
Tengervíz	0,2
Agyag	2–20
Agyagmárga	5–50
Márga	5–50
Változó fajlagos ellenállású kőzetek	
Homok (nedves)	20–100
Homok (sós vízzel)	1–5
Homok (kiszáradtan)	50–1000
Kavics (nedves)	50–1000
Kavics (száraz)	100–10 000
Homokkő (mállott)	5–50
Homokkő (tömör)	100–20 000

Nagy az ellenállása a szilárd, kemény kőzeteknek. Ez utóbbiak lehetnek akár kőfalak vagy más építmények eltemetett maradványai is. A vezetőképesség mérésével következtetni lehet a nagy ellenállású és eléggé nagy méretű tömbök helyzetére. De ugyanígy következtetni tudunk egykori árkok, pincék helyére is, ha a beléjük kerülő anyagok, törmelékek más szerkezetűek, például nagyobb pórustérfogatúak, mint az eredeti, bolygatatlan talaj. Az első esetben a környezetnél nagyobb, a másodikban a környezeténél kisebb ellenállás árulja el, hogy valami figyelemre méltó rejtőzhet a felszín alatt.



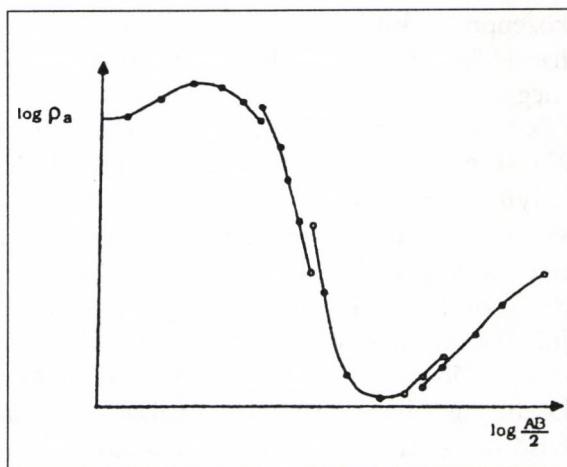
4. ábra. Az ellenállás meghatározásának egyik módszere: a talajba A és B elektródákkal áramot vezetünk, és mérjük az ennek hatására kialakuló feszültséget az M és N elektródák között

Az egyenáramú szondázást úgy végezzük, hogy a 4. ábrán vázolt módon, az A és B áramelektrodákkal egyenáramú jelet bocsátunk a talajba, és az M és N potenciálelektrodák közötti megmérjük az ennek hatására kialakuló feszültséget. A homogén, mindenütt azonos ellenállású közegben kialakuló áramvonalakat a vastag vonalak, az azonos potenciálú felületeket, az úgynevezett ekvipotenciális felületek függőleges metszeteit a vékonyabb vonalak érzékeltek. Jól látszik, hogy az áram nagy térfogatban folyik, emiatt

az áramerősségből és feszültségből csak egy nagyobb térfogatra jellemző látsszólagos fajlagosellenállás-értéket tudunk kiszámítani. Tudjuk azonban változtatni az árambevezető és a potenciált mérő elektródák helyzetét. Például, amikor az árambevezető elektródák távolsága növekszik, az áram egyre nagyobb mélységekben (is) folyik. A mérési elrendezés más menynységeit állandó értéken tartva és a méréseket sok különböző távolsággal elvégezve, a látsszólagos fajlagosellenállás- értékekből úgynevezett vertikális elektromos szondázási görbe rajzolódik ki. Ennek egy példája látható az 5. ábrán. A vízszintes tengelyen az árambevezető elektródák távolsága, a függőleges tengelyen a látsszólagos fajlagos ellenállás a változó. Mindkét tengely logaritmikusan skálázott.



A szondázási görbe alakja jellemző a fajlagos ellenállás mélység szerinti változására. Könnyen áttekinthető az az eset, melyben nagyon vastag és emiatt ún. félvégtelen közeg tetején egy attól eltérő fajlagos ellenállású másik réteg van. A tapasztalatok szerint csaknem mindig a felső réteg fajlagos ellenállása a kisebb, és a vízszintes réteghatár sokszor elfogadható közelítés. Amikor az áramot bevezető elektródák távolsága kicsiny, az áram lényegében csak a felső ré-



5. ábra. Egyenáramú elektromos szondázási görbe: különböző AB elektródátávolságokkal mért látszólagos fajlagos ellenállás

tegben folyik, és a kapott látszólagos fajlagos ellenállás közelítőleg megegyezik a felső réteg (valódi) fajlagos ellenállásával. Amikor az áramot bevezető elektródák távolsága nagy, az áram döntően az alsó rétegben folyik, a mérésből levezetett látszólagos fajlagos ellenállás közelítőleg egyezik az alsó réteg fajlagos ellenállásával. A közbülső helyzetekben kapott látszólagos fajlagos ellenállások e két érték közé esnek. Ez egyben világossá teszi, miért használjuk a „látszólagos” jelzőt.

A szondázási görbe alakja a felső réteg vastagságától is függ. Ha a réteg vékony, már viszonylag kis árambevezető elektróda-távolságoknál kezdődik a növekedés. Ha a réteg vastag, csak jóval nagyobb távolságnál tapasztaljuk ugyanezt. Amikor több réteg van, a szondázási görbe alakja is bonyolultabb. Sok különböző távolsággal mérve azonban a bonyolultabb esetekben is meghatározhatjuk az egyes rétegek fajlagos ellenállását és a réteghatárok mélységét. Erre később gyakorlati példát is adunk (15. ábra).

A módszerrel elérhető mérési pontosság elég jó, a hiba általában 1%-nál kisebb. A mélységeket mégis csak ennél jóval nagyobb hibával tudjuk meghatározni, ugyanis a rétegek nem vízszintesek, és a fajlagos ellenállás az egyes rétegeken belül is változik. Ezeket a tényezőket azonban a számításokban nem tudjuk figyelembe venni.

A vertikális szondázások méréssorozatát több helyen is elvégezhetjük – például egy vonal mentén, egymástól azonos távolsággal eltolt mérési elrendezés-

középpontokkal. Így eljárva, az ellenállásról egy egész szelvény mentén alkotunk képet. A legkisebb és legnagyobb AB távolságot a kutatási feladat szabja meg.

Gyors tájékozódásra az is elegendő lehet, ha egyetlen jól választott AB távolsággal végzünk méréseket. Ilyenkor az elektródák egymáshoz viszonyított helyzete nem változik, az egymást követő mérésekben az egész elektródarendszert a szelvény mentén, egyenlő lépésekben áttelepítjük. Ekkor nem több réteghatár mélységének és a rétegek fajlagos ellenállásainak a meghatározására törekszünk, csupán egyetlen réteghatár mélységváltozásait próbáljuk követni. Jól választott elektróda-távolságokkal a látszólagos fajlagos ellenállás értékéből erre általában következtetni lehet. Mivel csaknem mindig a felső réteghatár a kisebb ellenállású, a látszólagos fajlagos ellenállás csökkenése azt jelzi, hogy a felső réteg kivastagodott, míg a látszólagos fajlagos ellenállás növekedése a felső réteg vékonyodására utal. Természetesen részletesebb képet kapunk, ha több különböző áramot bevezető elektróda-távolsággal is végigmérjük a szelvényt. A mérésekből – bár csak közelítőleg – ekkor is meghatározhatjuk a fajlagos ellenállást a szelvény mentén, a mélység függvényében, azaz szintén fajlagosellenállás-szelvényt számíthatunk.

### *Elektromágneses ellenállásmérések*

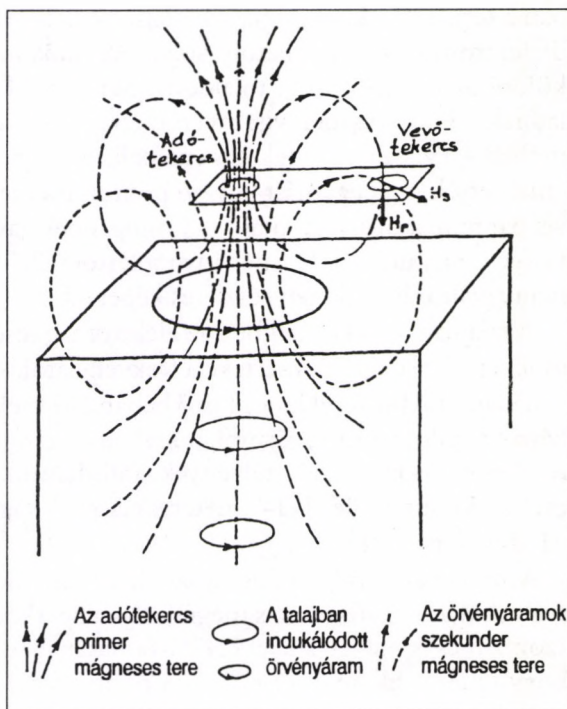
A módszer az indukció jelenségén alapul. Az adó tekercsben folyó nagyfrekvenciás, néhány kHz és néhányszor 10 kHz közötti periódusú váltóáram ugyancsak periodikusan változó mágneses teret hoz létre. Ezt elsődleges mágneses térnek nevezhetjük. Az időben szintén periodikusan változó elsődleges mágneses tér a talajban örvényáramokat indukál. Az örvényáramok következtében pedig másodlagos mágneses tér alakul ki. Ezt észleljük a vevőtekercssel. Az örvényáramok intenzitása és így a másodlagos tér erőssége az általában használt frekvenciákon szinte kizárólag a talaj fajlagos ellenállásától függ. A vevőtekercs természetesen a teljes teret érzékeli, ami az elsődleges és a másodlagos mágneses tér összege, de az első pontosan számítható és az összegből levonható. A számítási folyamat végén ismét megkapjuk a talaj fajlagos ellenállását.

Egy lehetséges mérési elrendezést a 6. ábra mutat be, melyben mindkét tekercs vízszintes. Az elsődleges mágneses tér erővonalait hosszabb szaggatott vonallal, az örvényáramok keltette másodlagos mágneses tér erővonalait rövidebb szaggatott vonallal ábrázoltuk. A tekercsek távolsága néhány méter.

A frekvencia változtatásával és kisebb mértékben a tekercsek magasságának módosításával néhány kísérlettel beállítható az a mélységtartomány, melynek



valódi fajlagos ellenállása a legnagyobb járulékot adja a számított látszólagos fajlagos ellenállásra. Vízszintes síkban elhelyezett tekercsek esetén a legnagyobb a felszín közvetlen környezetének hatása, és ez a felszíntől mért távolsággal gyorsan csökken. A néhány méter mélységű rétegek fajlagos ellenállása a meghatározott értéket már alig befolyásolja. Vertikálisan elhelyezett tekercseknél a felszíni ellenállás hatása zérus, és a maximális hatást általában az 1-2 méter közötti mélységre állítják be. Természetesen az ennél nagyobb mélységű rétegek ellenállása is hat a kapott értékre, csak kisebb mértékben. Nagy előnye a módszernek, hogy elektródákat nem kell a földbe helyezni, emiatt a mérés igen gyors, rövid idő alatt sok ponton mérhetünk, és a hálózatban mért adatokból könnyen szerkeszthetünk térképet. Megjegyezzük, hogy indukciós elven működnek a különböző fémkereső eszközök is, de ezek behatolási mélysége olyan kicsiny, hogy csak speciális, felszín közeli fém-  
tárgyak megtalálásában lehetnek hasznosak, környezeti geofizikai alkalmazásuk erősen korlátozott.



6. ábra. A váltóáramú mérés lényege: az adótekercsben folyó váltóáram mágneses teret kelt, ez a talajban örvényáramokat indukál, melynek terét a vevőtekercssel észleljük. Az elsődleges mágneses tér erővonalait hosszabb szaggatott vonal, az örvényáramok keltette másodlagos mágneses tér erővonalait rövidebb szaggatott vonal ábrázolja

### Földradar-mérések

Az indukciós szelvényezéshez hasonlóan a földradar is elektromágneses módszer, azonban jóval nagyobb, 100 MHz és 1 GHz közötti frekvenciájú, jól fókuszált elektromágneses hullámokat használ. Ebben a frekvenciatartomány-

ban a terjedést a közeg fajlagos ellenállásánál már jóval nagyobb mértékben a dielektromos állandó befolyásolja. Az adóantenna által kibocsátott jelek a különböző dielektromos tulajdonságú rétegek határain nagyobb részben áthaladnak, kisebb részben visszaverődnek. A vevőantenna – számos más hullám mellett – a visszavert jeleket is érzékeli, és megfelelő feldolgozással ezeket ki is emelhetjük. Sok egymást követő ponton mérve és egymás mellé felrajzolva a vevőantennából nyert, majd számítógéppel javított jelsorozatot, olyan szelvényt kaphatunk, mely a néhány métertől néhányszor tíz méter mélységtartomány változásairól igen részletes képet ad.

A talajban és a közetekben az elektromágneses hullámok energiája gyorsan csökken. A csökkenés mértéke a frekvenciától is függ, emiatt különböző frekvenciájú hullámokkal különböző behatolási mélységű szelvények készíthetők. Mivel a kibocsátott sugárnyaláb keskeny, igen jó felbontóképességű, a finom részleteket is kimutató szelvényeket állíthatunk elő, melyeken a réteghatárok mellett kis kiterjedésű (1-2 méteres) tárgyak vagy épületmaradványok, üregek stb. is láthatóvá tehetők.

Mindkét antennát földön húzott kis kocsin helyezik el, a műszer digitálisan regisztrálja és grafikusán is megrajzolja a beérkező hullámok képét. Ez utóbbit azonban csak előzetes tájékozódásra használják, lényegében ezzel ellenőrzik, hogy a mérés sikeres volt-e. Az egy ponton végzett mérés egyetlen, ún. csatornát ad, mely az elektromágneses hullámoknak megfelelő rezgés képe.

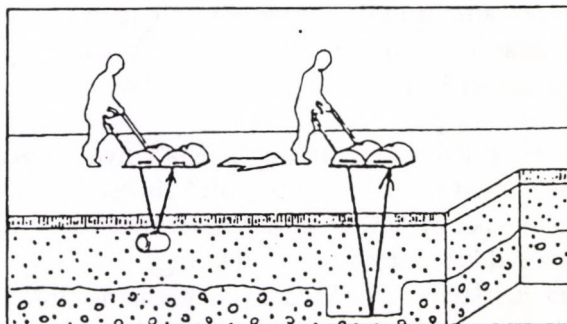
3. táblázat

*Elektromágneses hullámok terjedésére jellemző adatok néhány, a gyakorlat számára fontos anyagban*

Anyag	Dielektromos állandó ( $\epsilon$ )	Elnyelés (dB/m)	Terjedési sebesség ( $10^8$ m/s)
Levegő	1	0,00	30,00
Víz	81	0,18	3,30
Sós víz	81	320	3,30
Száraz homok	3	0,14	15–20
Vízzel telített homok	25	2,30	5,00
Agyag (száraz)	3	0,28	9,00
Agyag (nedves)	15	20,00	9–10
Aleurit (nedves)	7	45,00	11,00
Homokkő (nedves)	6	24,00	12,00



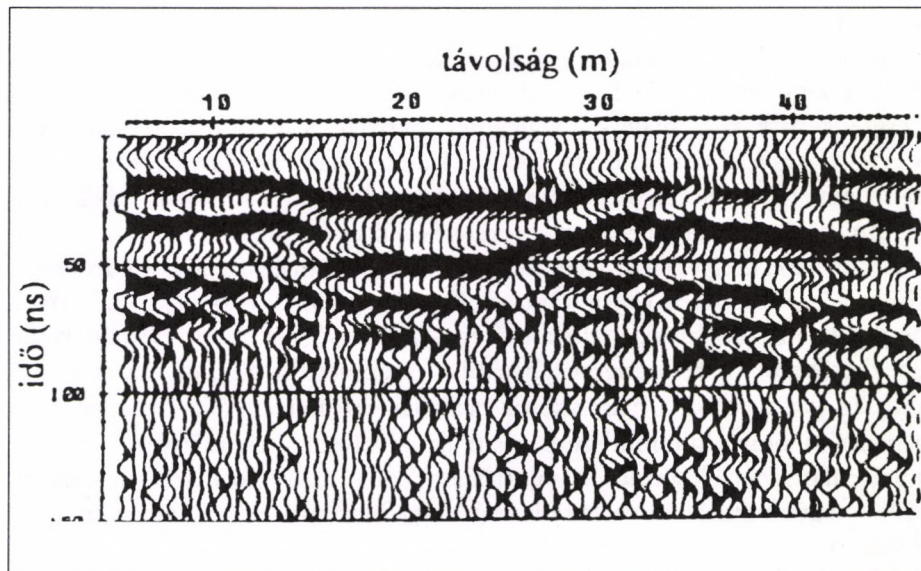
A rezgést az idő függvényeként regisztráljuk, a mélységet a sebesség ismeretében lehet (később) számítani. Néhány anyag (kőzet, talaj) földradar-mérés szempontjából fontos jellemzőit a 3. táblázat foglalja össze. Rendszerint vonal mentén mérünk, nagyon sok egymást követő ponton. A végeredmény a



7. ábra. A földradar-módszer mérési elrendezése

sok egymás mellé felrajzolt csatornából álló szelvény, mely bonyolult, soklépéses, számítógépes feldolgozás eredménye.

A mérést vázlatosan a 7. ábra mutatja be, a 8. ábra pedig egy földradar-szelvény. A függőleges tengelyen változóként már a számítással kapott mélység szerepel. Az egyes csatornák olyan sűrűn követik egymást, hogy egymástól szinte meg sem különböztethetők. Jól látszik azonban, hol nagyobbak a rez-



8. ábra. Földradar-szelvény. Az egymás mellé felrajzolt csatornák kirajzolják a reflektáló felületek képét. A szóró- (diffraktáló-) pontok diffrakciós hiperboláik alapján ismerhetők fel

gések amplitúdói. Ezek szinte kirajzolják az elektromágneses hullámokat visszaverő határok mélybeli képét. Amikor a visszaverő tárgy mérete kicsiny (pontszerű), a szelvényen az optikából jól ismert diffrakciós görbék jelennek meg.

Ezek lefelé – a mélység felé – kinyúló hiperbolák, csúcsuk mélységében helyezkedik el a hullámok szóródásáért felelős tárgy. A földradar-szelvények nemcsak egy-két réteghatár követésére, de a méter nagyságrendbe eső, környezetüktől eltérő alakulatok vagy építménymaradványok, esetleg tárgyak megtalálására is alkalmas. Ilyenek lehetnek föld alatti járatok, pincék, folyosók, elég nagy méretű csövek, hordók, tartályok stb. Megjegyzendő, hogy amikor túlságosan sok visszaverő felület vagy a hullámokat szóró pont van, a kép áttekinthetetlenné válhat.

### *A földrengés-veszélyeztetettség meghatározása*

A földrengés-veszélyeztetettség tudományos igényű meghatározása az utóbbi évtized vizsgálatainak alapszik. Ez az összetett, nehéz feladat jó példa arra, hogy eredmény csak több tudományterület közös erőfeszítésétől, jó együttműködésétől várható. Ezek között a környezeti geofizika is számos vizsgálatban kap szerepet.

Napjainkban a földrengés-veszélyeztetettséget másként ítélik meg, mint akár egy vagy két évtizede. Ennek alapvető oka az, hogy a földrengések igen sok – esetenként katasztrofális – meglepetést okoztak, számos halálos áldozatot követeltek, és többszáz milliárd dolláros kárt okoztak, annak ellenére, hogy a leginkább érintett országok hatalmas összegeket költöttek kutatásra, obszervatóriumi hálózatok kiépítésére és földrengés-előrejelzésre.

A másik ok, melyet talán a legjobban az Európa Tanács az egyik földrengés-előrejelzéssel foglalkozó konferencián (Strasburg, 1991. október) fogalmazott meg, a következő: „Európa sebezhetősége – a lakosság, a környezet és gazdaság sebezhetősége – a földrengések hatásaival szemben kritikusan növekszik, a lakosság gyarapodása, a nagyvárosok talajának bizonytalan állapota és az infrastruktúra bonyolult rendszere miatt és az olyan létesítmények növekvő száma miatt, melyek sérülése katasztrófát okozhat. Ezen okok miatt sok lakott terület nagyon sebezhetővé vált olyan gyenge földrengések számára is, melyek nem okoztak károkat a múltban.”

A károk jelentős csökkentése érhető el a biztonsági előírások betartásával, melyek között vannak állandók, mint a megfelelő biztonságú építésre vonatkozók, vagy időlegesek, melyeket hosszú távú (néhány évtized) vagy rövid távú (néhány hét vagy kevesebb) előrejelzés esetén léptetnek életbe.



A földrengések előrejelzése (hosszú távú és rövid távú egyaránt) korlátozott pontosságú és megbízhatóságú. Ennek ellenére a károk jelentős része elkerülhető, ha megfelelő biztonsági intézkedéseket léptetünk életbe.

Az elmúlt évtizedekben készített és néhol – sajnálatos módon, az előbb idézett figyelmeztetés ellenére – még ma is pontosnak tekintett szeizmikusveszélyeztetettség-térképek alapvető hibája az, hogy a rendelkezésre álló megfigyelési anyagot elegendő mintának tekintik. Ez csak akkor igaz, ha a földrengéseket generáló tektonikai folyamatok időskálája rövidebb, mint a regisztrált földrengés-történelem. Csak a leggyorsabban mozgó kőzetlemezek határain, például Japánban rövidebb a földrengések visszatérési intervalluma, mint a történelmi feljegyzések hossza. Még az Egyesült Államok nyugati partvidékén húzódó Szent András-törésvonal esetében sem elegendő a mintegy 200 éves megfigyelési időtartomány a nagy rengések visszatérési periódusának megállapításához. Kelet felé mozogva ettől a nevezetes törésvonaltól a kéregdeformációk egyre lassúbbak, és a visszatérési intervallum is egyre hosszabb, valószínűleg néhány ezer év, majd a keleti partvidéken már százezer év vagy annál is több. A nagy rengések visszatérési periódusát a felszín közeli törésvonalakat keresztező feltárások részletes geológiai vizsgálatával, a rengések után megszakadó és elmozduló rétegek korának megállapításával becsülték meg.

A kis és közepes szeizmikus aktivitású országokban pusztán a történeti feljegyzések és statisztikák alapján egyszerűen nem lehet felelősséggel megállapítani a veszélyeztetettséget. Néhány ország mégsem akarja két évtizedes térképeit javítani, ugyanis akkor felül kellene vizsgálni a régebben hozott döntéseket, és le kellene vonni a sérülékeny létesítmények valódi veszélyeztetettségéből fakadó konzekvenciákat. Egyszerűbb reménykedni abban, hogy a döntéshozók számára belátható rövid időtartamban mégsem lesz nagy földrengés. Természetesen ennek is van bizonyos valószínűsége. Amikor azonban a remény szertefoszlik egy nagy, pusztító rengés miatt, a kár óriási, a közönség válasza drámai és kiszámíthatatlan lesz. Igen nagy emiatt a földtudományok ismerőinek a felelőssége, akik tudják, hogy a Föld folyamatai az emberi léptéktől különböző skálán mérendők, és ezen a skálán az emberi történelem egy pillanat. A felelősség mellett elegendő bátorságra is szükségünk van, mert ki kell mondani – akkor is, ha ez a többségnek nem tetszik –, hogy számos mérnöki döntést felül kell vizsgálni, mert azok hibásak és megalapozatlanok voltak, számos létesítményt be kell zárni vagy meg kell erősíteni, továbbiak építését pedig abba kell hagyni.

A földrengések hatását két, lényegesen különböző skálával mérik. A helyi megrázottságot adja meg az intenzitás, a felszabaduló energia logaritmussával arányos a magnitúdó. Ez utóbbit a skálát elsőként javasló szeizmológus tiszte-

letére Richter-skálának nevezik. Az intenzitásskála 12 fokozatú, a Richter-skála „nyitott” abban az értelemben, hogy nincsen felső határa. Bevezetése óta azonban nem tapasztaltak (kerekítve) 9 magnitúdónál nagyobb rengéseket.

A magnitúdó egyetlen számmal jellemzi a földrengést, az intenzitás jelentősen változik, attól függően, milyen távol vagyunk a rengés epicentrumától (a legjobban megrázott helytől). De lényeges a földrengés fészekmélysége is. Mély fészekű rengés epicentrumában nem nagy az intenzitás – még akkor sem, ha a rengés magnitúdója egyébként nagy. A magnitúdó, fészekmélység és az epicentrumban kialakuló lehetséges intenzitások közötti kapcsolatot – néhány számunkra érdekes esetre – a 4. táblázatban foglaljuk össze Runcorn, 1967 nyomán:

4. táblázat

*Különböző magnitúdójú és fészekmélységű rengések lehetséges maximális (epicentrális) intenzitása*

Fészekmélység (km):	5	15	45
magnitúdó			
7,5 és 8,5 között		10-nél nagyobb	9–10
6,5 és 7,5 között	10-nél nagyobb	9–10	7–8
5,5 és 6,5 között	9–10	7–8	5–7
4,5 és 5,5 között	7–8	5–7	kisebb, mint 5

A Magyarországon lehetséges rengésekre a táblázat utolsó két sora vonatkozik. A fészekmélységtől függően maximális intenzitásuk az 5 (vagy annál is kisebb) értéktől a 9, esetleg 10 fokig terjed.

A felszabaduló energia nagyságát néhány összehasonlítással érzékeltetjük. Az 1 tonna TNT ekvivalens robbanóanyag robbantásakor felszabaduló energia nagyjából 4,4 magnitúdójú rengésnek felel meg, míg egy 20 kilotonnás atomtöltet felszabaduló energiája egy mintegy 6,5 magnitúdójú rengés energiájával azonos. Magyarország évi teljes energiaszükségletét fedezné – ha hasznosítani lehetne – egyetlen 8–8,5 közötti magnitúdójú rengés energiája.

A magnitúdók statisztikus feldolgozása alapján megállapítható volt, hogy a nagy rengések sokkal ritkábbak, a kisebb magnitúdójúak sokkal gyakoribbak. Elég jó közelítés a logaritmikus kapcsolat, a gyakoriság logaritmusa a magnitúdóval lineárisan csökken.

Fontos megfigyelés, hogy még aszeizmikus területen is vannak nagy rengések – akár 8 vagy annál nagyobb magnitúdójú rengések is –, csak sokkal ritkábban. A teljes Földre vonatkozó gyakoriság adatok szerepelnek az 5. táblázatban,



ahol a magnitúdó mellett a felszabaduló energiát és a rengés hatását is megadjuk. A hatás sekély rengésre és az epicentrum közvetlen környezetére vonatkozik.

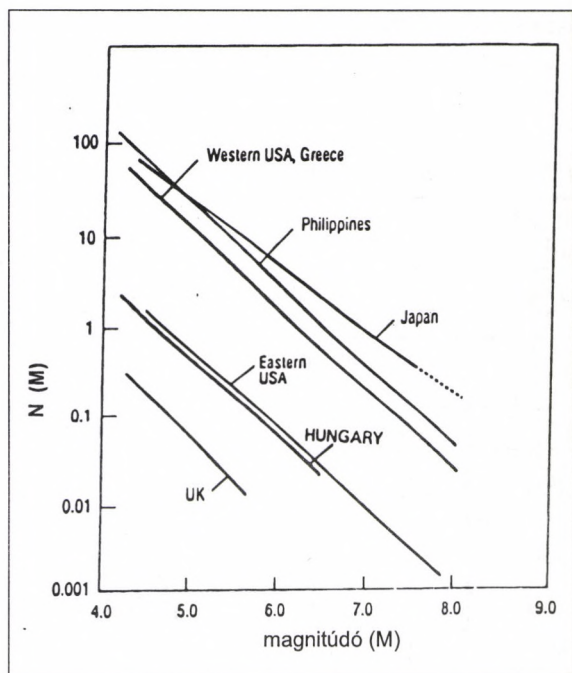
5. táblázat

*Különböző magnitúdójú rengések száma, energiája, hatása*

Magnitúdó	Rengések száma (éves átlag)	Energia (Joule)	Hatás
nagyobb, mint 8	0,1–0,2	nagyobb, mint $10^{18}$	katasztrofális károk
nagyobb, mint 7,4	4	nagyobb, mint $4 \cdot 10^{15}$	nagy károk
7,0–7,3	15	$(0,4–2) \cdot 10^{14}$	jelentős károk
6,2–6,9	100	$(0,5–23) \cdot 10^{13}$	jelentős épületkárok
5,5–6,1	500	$(1,0–27) \cdot 10^{12}$	kisebb épületkárok
4,9–5,4	1 400	$(3,6–57) \cdot 10^{10}$	mindenki érzi
4,3–4,8	4 800	$(1,3–27) \cdot 10^9$	sokan érzik
3,5–4,2	30 000	$(1,6–76) \cdot 10^8$	néhányan érzik
2,0–3,4	800 000	kisebb, mint $10^7$	csak műszerrel érzékelhető

Kisebb területekre vonatkozó részletesebb vizsgálatokat összegez a 9. ábra, mely Magyarországot néhány jellegzetes területtel hasonlítja össze. Az egymillió négyzetkilométer nagyságú területen egy év alatt tapasztalt, adott magnitúdónál nagyobb magnitúdójú rengések számának logaritmusát ábrázolja a magnitúdó függvényében. Látszik, hogy a hazai földrengés-tevékenység jóval kisebb, mint Japáné vagy akár az Egyesült Államok nyugati területeié, sokkal nagyobb azonban, mint Nagy-Britanniáé, és nagyjából az Egyesült Államok keleti területeinek aktivitásával egyezik meg. Az ábráról például leolvasható, hogy Magyarországon a 4,5 (vagy annál nagyobb) magnitúdójú rengések körülbelül olyan gyakoriak, mint Japánban a 7 (vagy annál nagyobb) magnitúdójúak. A nagy rengések mindenütt sokkal ritkábbak.

A viszonylag nagyobb (4,0-nél nagyobb magnitúdójú), 1880–1991 között kipattant rengések területi eloszlását Magyarországon és tágabb környezetében a 10. ábra mutatja be. A teljes országra vonatkozó intenzitás ( $I_0$ ) és gyakoriság (N) közötti kapcsolat az MTA Szeizmológiai Obszervatóriuma szerint az utóbbi, valamivel több mint 100 év megfigyelési anyagának alapján:



9. ábra. Az egymillió négyzetkilométer nagyságú területen egy év alatt tapasztalt, adott magnitúdónál nagyobb magnitúdójú rengések számának logaritmus a magnitúdó függvényében. A kapcsolat azt fejezi ki, hogy a nagy rengések sokkal ritkábbak, de egyes területek között jelentős különbségek vannak

azt is, mekkora energia szabadul fel egy adott időszakban a magnitúdó függvényében. Az eredmény azt mutatja, hogy az energia-felszabadulásban a nagy rengések szerepe a döntő.

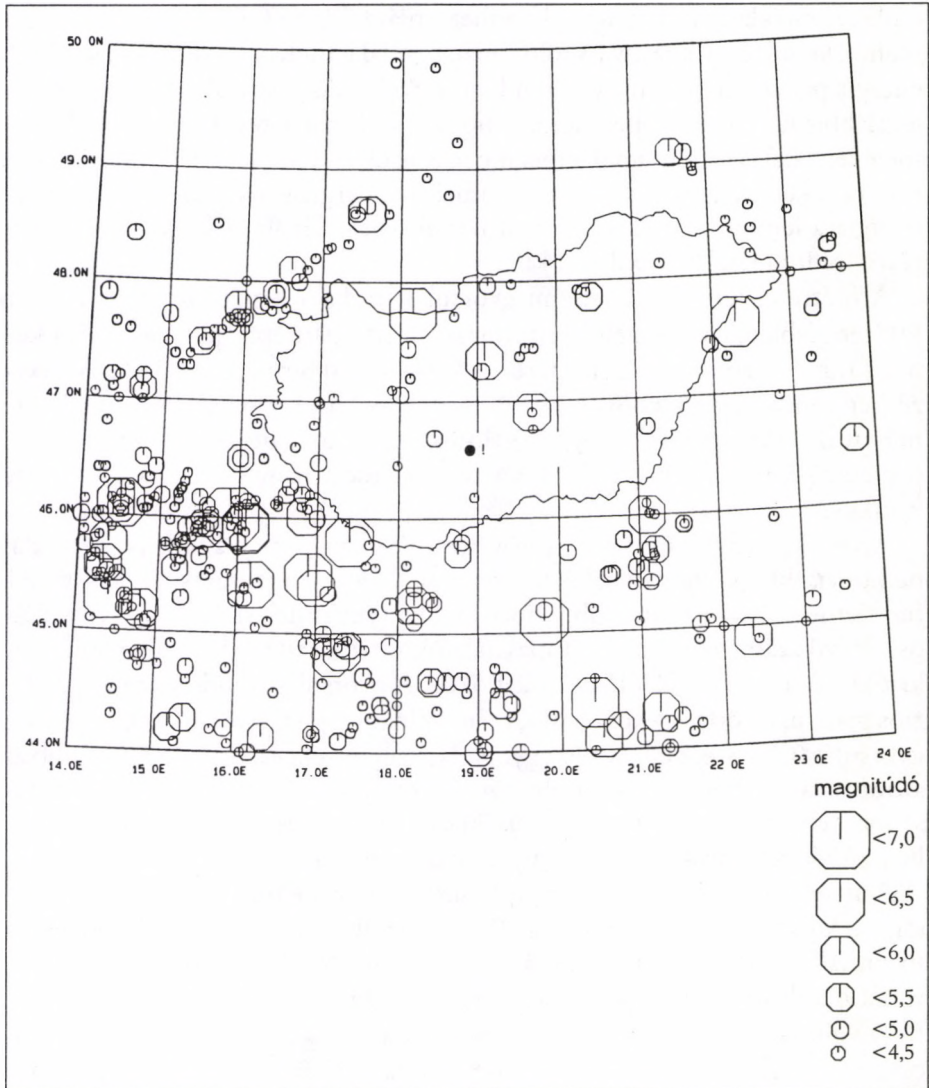
Annak ellenére, hogy rendkívül sok kis magnitúdójú rengés van, ezek összesített energiája messze elmarad a néhány nagy rengés kipattanásakor felszabaduló energiától. A teljes Földet tekintve, a 8-nál nagyobb magnitúdójú rengések a teljes felszabaduló energia mintegy 50%-át adják, a 6-nál nagyobb magnitúdójú rengések pedig már a teljes energia 90%-át. Ez egyértelműen bizonyítja, hogy a tektonikai mozgások során felhalmozódó feszültség nem oldódhat ki sok kis rengéssel. Nem lehet megelőzni a „nagy” rengést azzal, hogy valamilyen módszerrel (például robbantásokkal) sok kis rengés gerjesztésére törekszünk.

$$\log N = 1,73 - 0,42 I_0.$$

(Az első együttható hibája 0,12, a másodiké 0,02.) A képletből kitűnik, hogy 4° intenzitású rengésre minden évben kell számítani, 6° intenzitású rengés nagyjából évtizedenként egy, esetleg kettő fordul elő, 8° epicentrális intenzitású rengés egy évszázadban nagyjából kétszer pattanhat ki, végül a 9° intenzitású rengések között átlagosan több mint egy évszázad idő is eltelhet. A kapcsolat statisztikus jellegű, és csak azokra az intenzitásokra megbízható, amelyeket a kapcsolat levezetésénél ténylegesen felhasználtak.

A magnitúdó és a felszabaduló energia kapcsolatát megadó képletet a magnitúdó-gyakoriság kapcsolatba beírva, megkaphatjuk





10. ábra. A 4,0-nél nagyobb magnitúdójú, 1880–1991 között kipattant rengések területei eloszlása Magyarországon és tágabb környezetében

Az egy év alatt felszabaduló teljes energia  $10^{18}$  és  $10^{19}$  Joule közé esik. Nem azonos az egymást követő években, de ingadozása nem is túlságosan nagy. Ez azt mutatja, hogy a Föld egészét tekintve a feszültség felhalmozódása és kioldódása rengésekben nagyjából stacionárius. Az energiaszabadulás – bár

emberi léptékkel mérve nagyoknak tűnhet – más földtani folyamatok energiaáramához képest elég kicsiny. A földi hőáram által a mélyből a felszínre szállított energia például három nagyságrenddel nagyobb. Az energiák összehasonlítása legalábbis nem mond ellent annak, hogy a földrengés-tevékenységet a hőtermelés és a hatására létrejövő lemezmozgások kísérőjelenségének tekinthessük. A lemezeket mozgó konvekciós áramlások energiaigényei mellett bőven jut energia a lemezek peremterületein feszültségek felhalmozására, melyek egy része földrengésekben oldódik ki.

A mérnöki tervezés a felszíni gyorsulást tudja a legjobban hasznosítani földrengésbiztos szerkezetek létrehozására. Minden építménynek állva kell maradnia a normál gravitációs térben – azaz ki kell bírnia saját súlyát. A tervezésben rendszerint, bizonyos ráhagyással, ennél nagyobb terhelés elviselésére méretezik. Emiatt a földrengéshullámok vertikális (függőleges irányba eső) összetevőjének hatása – eltekintve a különlegesen nagy rengésektől – nem kritikus.

A vertikális irányú gyorsulásokat az építmények még akkor is károsodás nélkül viselik, ha a potenciális földrengések hatását a tervezésnél nem vették figyelembe. Annál fontosabb a horizontális (vízszintes síkba eső) gyorsulás-összetevő számításba vétele. Tapasztalatok szerint a vízszintes gyorsulás egy kritikus érték felett jelentős károkat okoz. A gyorsulást rendszerint a gravitációs gyorsulás törtrészeként adjuk meg. Például  $1 \text{ ms}^{-2}$  gyorsulás  $0,1 \text{ g}$ ,  $2 \text{ ms}^{-2}$  gyorsulás  $0,2 \text{ g}$  stb. Lényeges a gyorsulás csúcserőértéke is, de még fontosabb az az időtartam, amely alatt – mindvégig – nagy a gyorsulás. Ennek meghatározásához rendszerint a  $0,05$  küszöbértéket használják, és azt adják meg, milyen hosszú időtartamban nagyobb a gyorsulás a küszöbértéknél.

Alapvető tapasztalat, hogy szilárd talajon, néhányszor tíz kilométer távolságban kipattant, mérsékelten nagy (5 és 7 közötti magnitúdójú) földrengésre a maximális gyorsulás  $0,05 \text{ g}$  és  $0,35 \text{ g}$  közé esik. Néhány esetben a nagyfrekvenciás hullámok meglepően nagy gyorsulásokat is létrehozhatnak. Például a Bear Valley-i (Kalifornia), 1972. szeptember 4-i rengés, melynek magnitúdója csak  $4,5$  volt, vagy az 1972. június 21-i anconai (Olaszország) rengés, melynek magnitúdója  $4,7$  volt, egyaránt  $0,6 \text{ g}$ -nél nagyobb horizontális gyorsulásokat okoztak néhány kilométeres észlelési távolságokban. Ugyancsak általános tapasztalat, hogy a vertikális irányú gyorsulás maximuma mintegy fele a horizontális irányú gyorsulásnak.

Végül igen lényeges megfigyelés, hogy egy földrengés hullámainak laza talajon mért gyorsulása jelentősen nagyobb, mint ugyanazon földrengés hullámainak ugyanakkora távolságban, de a kemény kőzeten mérhető gyorsulása. A különböző rugalmas paraméterű rétegek vagy rétegsorok átviteli tulajdonsá-



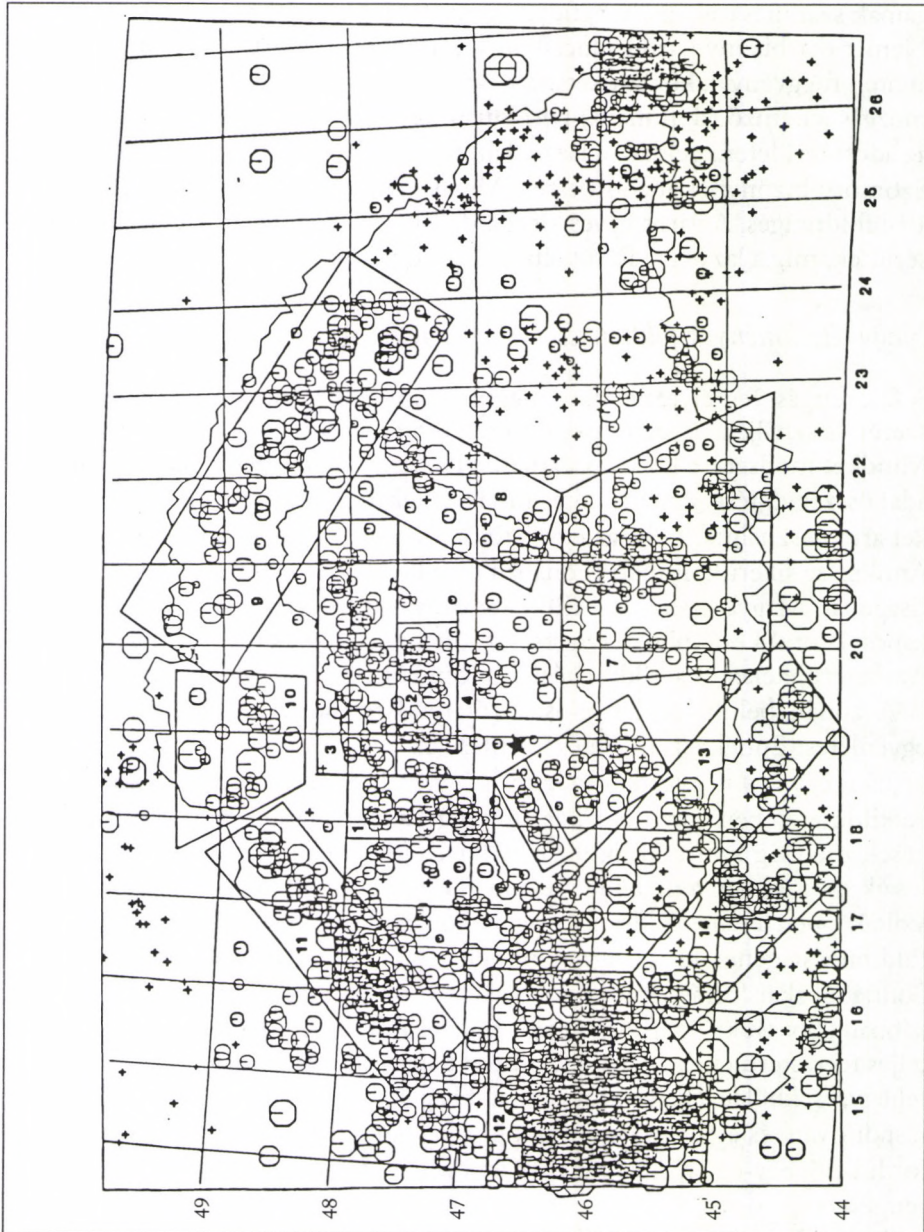
gainak számításával ez a megfigyelés magyarázható, illetve előre is jelezhető. Nem ritka bizonyos frekvenciákon a különböző típusú rétegekre jellemző átviteli függvények közötti kétszeres vagy még nagyobb szorzó. Ha ez a talajmozgás jellemző (domináns) periódusú összetevőire is érvényes, a rezgések az adott területen, például a laza talajrétegek felszínén mintegy felerősödnek. Szomorú bizonyítékot adott erre a Mexikóváros környéki, 1985. szeptember 19-i földrengés. A város egyes – szilárd alapozásra épült – részei mérsékelten sérültek, míg a laza talaj fölötti épületek szinte teljesen elpusztultak.

### *Nagy létesítmények földrengés-veszélyeztetettsége*

A földrengés-veszélyeztetettség meghatározásának jelenleg két alapvető módszerét használják: a statisztikus módszert és a determinisztikus módszert. Mindkét módszerre közös valamennyi szeizmológiai, geológiai és geofizikai adat összegyűjtése. A statisztikus módszer alkalmazásakor ezeket az ismereteket arra használjuk, hogy az egyes földrengés-generáló zónákat elkülönítsük. Amikor ez sikerült, minden zónában meg kell határoznunk a jellemző gyakoriságokat. Magyarországon belül a maximális intenzitás és gyakoriság közötti kapcsolatot 14 különböző rengéses területre határozták meg (Zsíros T., 1991). A részterületeket és a földrengések epicentrumait a 11. ábra mutatja be.

A zónán belüli területi eloszlásról rendszerint azt tételezzük fel, hogy egyenletes. Ennek szemléletes jelentése az, hogy minden kis részterületen – például egy egy négyzetkilométeres négyzetekre bontott zóna minden négyzetkilométerében – azonos valószínűséggel pattan ki földrengés. Elvileg a rengések mélység szerinti eloszlását is figyelembe vehetjük, de ezt igen ritkán teszik meg, éppen a mélység szerinti eloszlás pontos ismeretének hiányában. Voltaképpen a teljes földrengés-generáló zónát helyettesítjük nagyon sok kis, földrengést generáló térfogatelemmel, melyek a további vizsgálatok szempontjából akár forráspontoknak is tekinthetők. Egy-egy forráspont sokkal ritkábban „bocsát ki” magából rengéshullámokat, mint a forrásterület, hiszen a teljes forrásterület – az összes forráspont – együtt adta a történeti és műszeres feljegyzésekből levezetett statisztikát. Ha például felosztásunkban 10 ezer forráspont van, és egy 4,0 magnitúdójú rengés a teljes zónában évente egyszer fordul elő, egy-egy forrás csak 10 ezer évenként generál egy 4,0 magnitúdójú rengést.

A következő lépés a vizsgált pontban a megrázottság statisztikájának számítása a zónában generált földrengések hatására. Ehhez egy további lényeges hatást is figyelembe kell vennünk: a földrengéshullámok gyengülését a megtett út során. Mivel a felosztás forráspontjai különböző távolságban vannak a



11. ábra. A statisztikus földrengés-veszélyeztetettség meghatározásához használt  
forrásterületek és a földrengések epicentrumai.

A körök nagysága a maximális intenzitásra utal (Zsíros T., 1990 nyomán)



vizsgált ponttól, a gyengülés mértéke is különböző lesz. Szigorúan véve a vizsgált pont és a forráspont közötti geológiai felépítést is figyelembe kellene venni, de rendszerint megelégszünk egy átlagos csökkenési együtthatóval, esetleg a területen belül is valamilyen egyszerű függvény szerint lassan változó csökkenési együtthatóval.

Amikor a felosztásokat valamennyi forrásterületre elkészítettük, és a gyengülési együtthatókat összegyűjtöttük, elegendő adatunk van a vizsgált pont megrázottságának statisztikus vizsgálatára. Az összes lehetséges forráspont távolságait és gyakoriságait használva megvizsgáljuk, milyen gyakorisággal (hány évenként) okoznak az adott távolságban adott intenzitású megrázottságot a forráspontban kipattanó rengések. A számítások eredménye egy intenzitás-gyakoriságot megadó adatrendszer.

Ez most már kizárólag a vizsgált pontra vonatkozik, annak lehetséges megrázottságát jellemzi. A gyengülés miatt a nagyobb intenzitásokhoz jóval kisebb gyakoriság tartozik, mint a  $\log N = a - bI_0$  szerinti csökkenésből következő érték. Rendszerint valamilyen kezdeti értéktől, például a  $4^\circ$  intenzitástól 0,1 lépésenként felfelé haladva valamilyen felső határig, például  $10^\circ$ -ig számítják ki az adott vagy annál nagyobb intenzitásértékek gyakoriságát. Jelölje ezt az adatsort  $f(I')$ .

Az utolsó lépés valószínűségek meghatározása a gyakoriságból. Mivel a földrengések jó közelítéssel Poisson-eloszlású, ritka események, annak a valószínűsége, hogy  $T$  időtartam alatt  $I_0 < I'$  intenzitást tapasztaltunk:

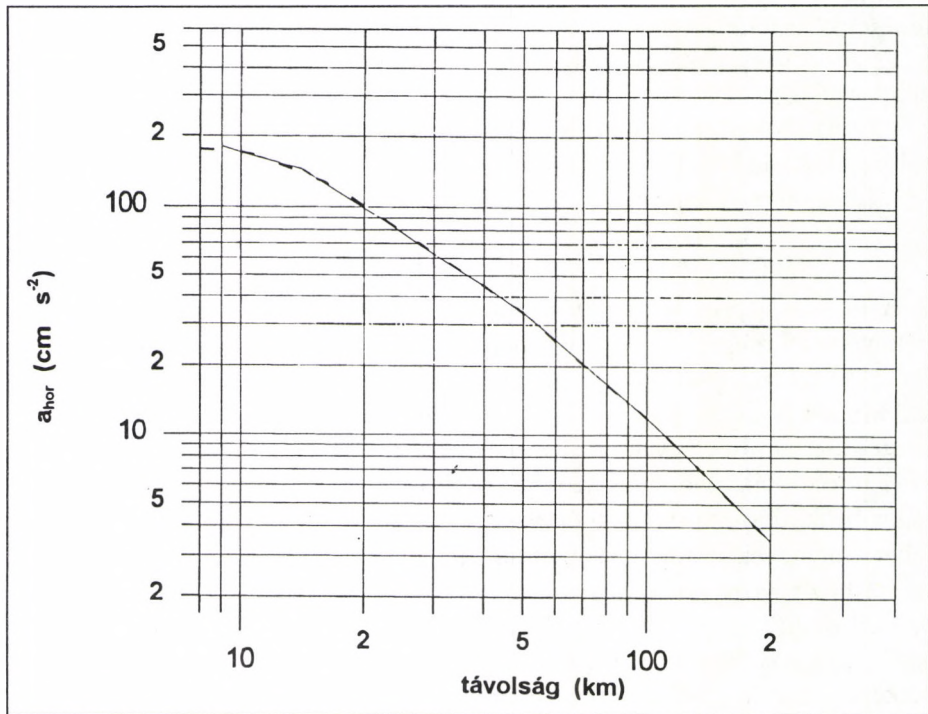
$$P(I_0 < I') = 1 - e^{-f(I')T}$$

A képlet alapján tetszőleges időtartam alatt akármilyen valószínűséggel bekövetkező megrázottság számítható. Különösen fontos és védendő létesítmények földrengés-veszélyeztetettségét az időtartamok és valószínűségek különböző szintjeivel jellemzik. Az építési szabványokban is rendszerint az adott időtartamhoz és valószínűséghez tartozó intenzitás vagy az abból következő horizontális gyorsulás szerepel. Például atomerőművek esetén a biztonságos működésre vonatkozó érték a  $T = 100$  év és a 0,5 valószínűségi szint lehet (úgynevezett OBE = operation basis earthquake), míg a biztonságos lezáráshoz tartozó érték meghatározásához a  $T = 10\,000$  évet és ugyancsak a 0,5 valószínűségi szintet választhatjuk (úgynevezett SSE = safe shutdown earthquake). Az első adat annak a földrengésnek az intenzitása, melynek bekövetkezése esetén a működésben még semmilyen zavar nem lesz. A második azt adja meg, hogy a működést ugyan abba kell hagyni egy ekkora rengés esetén, de az erőmű biztonságosan lezárható – anélkül, hogy a környezetébe radioaktív anyagok kerülnének ki (IAEA, 1984).

Nagyméretű víztárolók gátjaira lakott területek közelsége esetén rendszerint  $T = 30\,000$  évet írnak elő (ICOLD, 1987). Még hosszabb időtartamra kell számításokat végezni nagy aktivitású radioaktív hulladékok elhelyezésekor, hiszen az anyagot több százezer évig kell biztonságosan elszigetelni környezetétől.

A determinisztikus módszer közvetlenül a telephelyen becsüli meg a megrázottságot vagy az adott helyen várható legnagyobb gyorsulásokat, illetve a „legrosszabb esetben” kapható akceleroگرامot. A helyi geológiai viszonyok ismerete mellett ekkor szükségünk van egy reálisan feltételezhető bemeneti akceleroگرامra is.

Az adott helyet érintő lehetséges földrengések távolságát, a földrengés hullámokat gerjesztő felszakadás síkjának adatait, az úgynevezett fészekmechanizmust és a várható legnagyobb rengés magnitúdóját kell figyelembe vennünk. Mivel igen sok és sokféle fészekmechanizmusú, magnitúdójú és távolságú rengés akceleroگرامját regisztrálták és tárolják az adatbankokban, rendszerint sikerül kiválasztani néhány bemeneti akceleroگرامot, melyek elég jól jellem-



12. ábra. 5,5 magnitúdójú rengés maximális gyorsulásának változása. A folytonos vonal kemény, a vele csaknem pontosan egybeeső szaggatott vonal laza kőzetekre vonatkozik



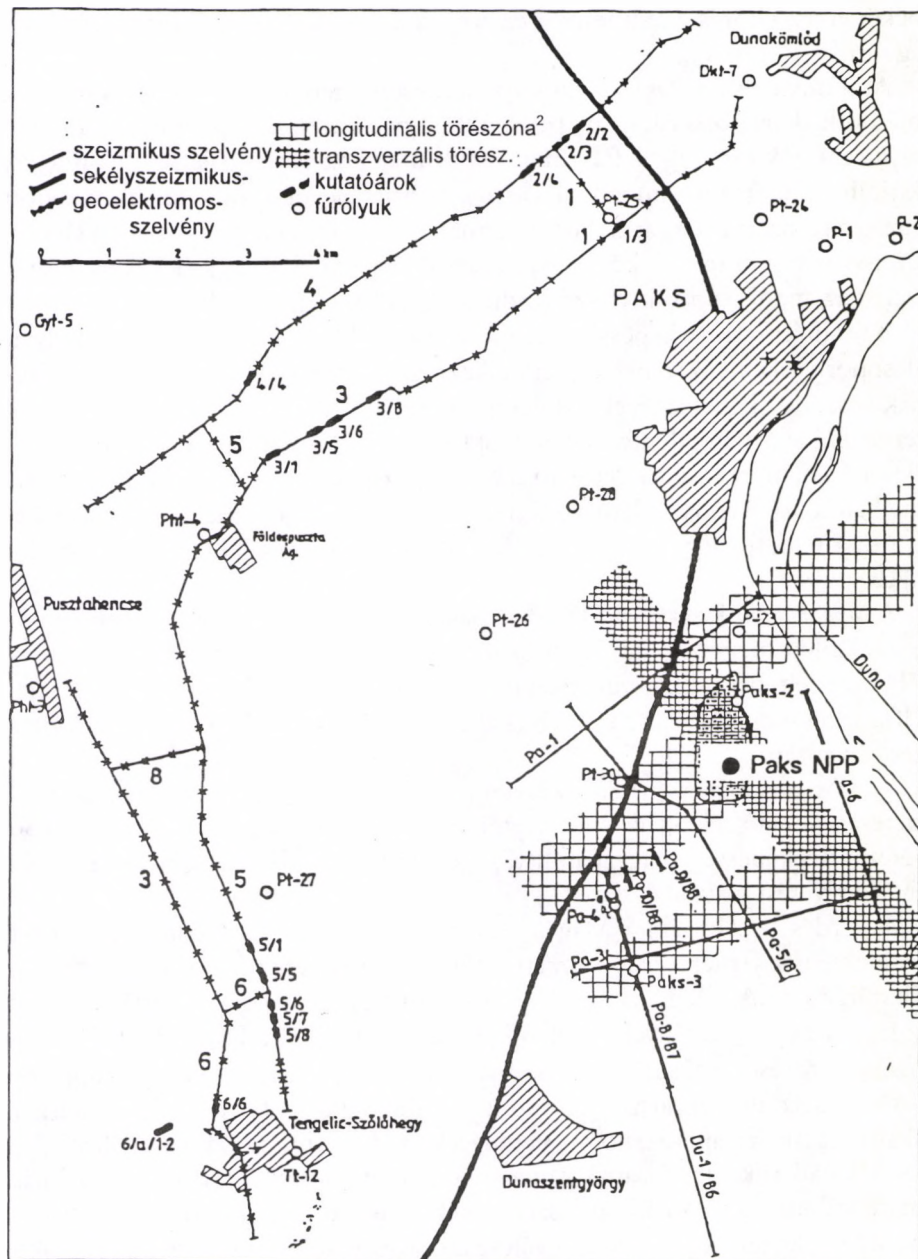
zik a veszélyeztetett létesítmény közelében elhelyezkedő földrengéses területek várható legnagyobb rengéseit. Feltételezve, hogy a szilárd alapkőzeten a gyorsulás az így kiválasztott bemeneti akceleroگرام szerint fog változni, a helyi geológiai viszonyok ismeretében az adott helyen kialakuló gyorsulás kiszámítható. A determinisztikus módszer legnagyobb nehézsége éppen a maximális feltételezhető rengés (a nemzetközi szakirodalomban MCE = maximum credible earthquake) kiválasztása. Komoly vita lehet szakemberek között abban, melyik területen és mekkora a maximális feltételezhető rengés. Különösen nehéz a döntés olyan kis és közepes aktivitású területen, ahol a rengések visszatérési periódusa jóval nagyobb, mint a megfigyelés időtartama. Hazánk is ilyen terület, ezért további megfigyelésekre és vizsgálatokra van szükség a maximális feltételezhető rengés magnitúdójának meghatározásához. Az biztosan kimondható, hogy Magyarországon az MCE legalább 6 magnitúdójú, de még nem tudjuk, hogy esetleg 6,5 vagy annál is nagyobb. Mivel 5,5 magnitúdójú rengések dokumentálhatóan voltak, ennek a rengésnek a maximális gyorsulását adjuk meg a távolság függvényében, a szakirodalom alapján (12. ábra). Látható, hogy nincsen lényeges különbség kemény és laza kőzetek között, a folytonos és szaggatott vonallal rajzolt görbék szinte egymásra esnek. Nagyjából 20 kilométer távolságban érjük el a 0,1 g értéket.

A nukleáris erőművek veszélyeztetettsége közismert, és komoly erőfeszítéseket is tesznek a biztonságos működtetésre – többek között Magyarországon is. Nem ilyen megnyugtató a helyzet más nagy létesítmények földrengés-veszélyeztetettségével kapcsolatban. Talán a mérnökök számára beláthatatlannak tűnő időtartamok miatt a földrengés-veszélyeztetettséget figyelmen kívül hagyják vagy elhanyagolhatónak vélik. Ettől azonban a veszélyeztetettség nem szűnik meg. Abból, hogy Magyarországon az utóbbi évtizedekben nem volt nagyobb földrengés, nem következik, hogy nem is lehet. A kis rengések mutatják, hogy a tektonikai folyamatok nem álltak le. A geodéziai módszerekkel jól nyomon követhető szintváltozások jelzik egyes területek emelkedését, mások süllyedését. A GPS (Global Positioning System)-mérések egyértelmű horizontális elmozdulásokat mutattak ki. A feszültségmérésekből is világosan kitűnik, hogy Magyarország nem feszültségmentes terület. A nagyobb mélységek viszonyait felderítő szeizmikus mérések sok törésvonalat – tört, zúzott övet – tártak fel, melyek egy része ma is aktív lehet vagy tektonikai aktivitása felújulhat.

A meglévő földrengés-statisztikák pontosításában és a veszélyeztetett létesítmény környezetének vizsgálatában elengedhetetlen a mikroszeizmikus megfigyelő-hálózat. Különös jelentősége van kis-közepes aktivitású területeken, mert elegendő sok és érzékeny műszert telepítve olyan, kis magnitúdójú







14. ábra. Elektromos szelvények nyomvonalai Paks környékén. Néhány további mérés nyomvonalát, illetve a törési zónákat is feltűnítettük

bekövetkező törés eredménye, ez az esemény általában földrengéssel jár együtt.

Amennyiben a válasz az aktivitás kérdésére igenlő, akkor lehet feltenni a második alapvető kérdést. Ez pedig az, hogy a létrejövő vetőzóna kiterjedése olyan mértékű-e, hogy a felszínen vagy annak közelében is létrejön a rétegek észlelhető nyírásos elmozdulása. Más szóval: elegendő-e a felhalmozódott energia felszabadulása arra, hogy valamelyik törési sík elérje és ez úton elvesse a felszínt vagy a felszín közeli tartományt? A vetőnek ezt a lehetséges potenciálját az angol „capability” szó fordításával „képesség”-nek hívjuk.

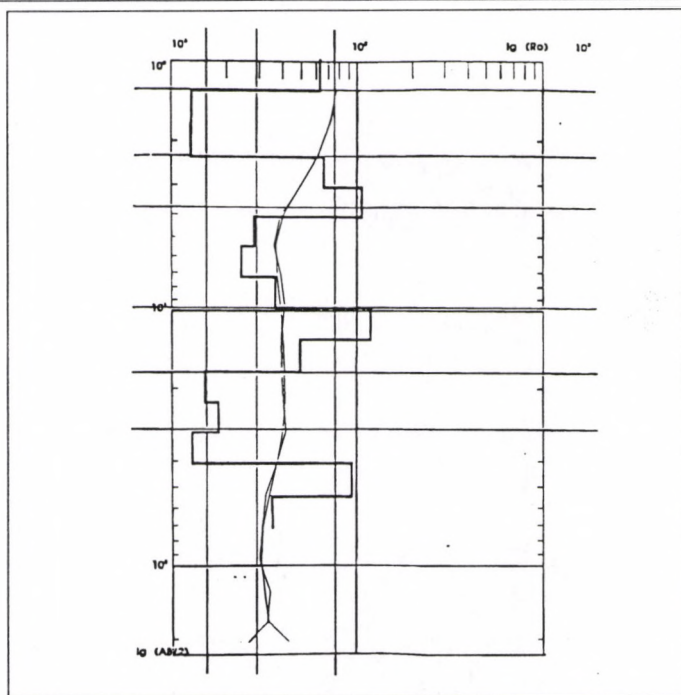
A fentiek szerint a képességgel rendelkező vetők az aktív vetőknek egy olyan alcsoportját képezik, amelyek rendelkeznek a felszíni elnyíródás létrehozásának veszélyes képességével. Értelmszerűen csak aktív vető lehet képességgel rendelkező, értelmetlen vizsgálni inaktív vető képességét. Következik ugyanakkor az is, hogy az aktív vetők másik alcsoportja az, amely nem képes a felszínig hatoló törésvonalak létrehozására, bár működik a jelenben is. Mindezeket pontosan definiálja a Nemzetközi Atomenergia-ügynökség útmutatója (IAEA, 1984).

A *capable fault* kizárására először a paksi atomerőmű környezetének geológiáját kellett megvizsgálni, különös tekintettel az erőmű közvetlen környezetében észlelt, pannóniai rétegeket is harántoló vetők korának megállapítására. Elfogadott tény, hogy az aljzatban található vetők közül több is reaktiválódott a neogén során.

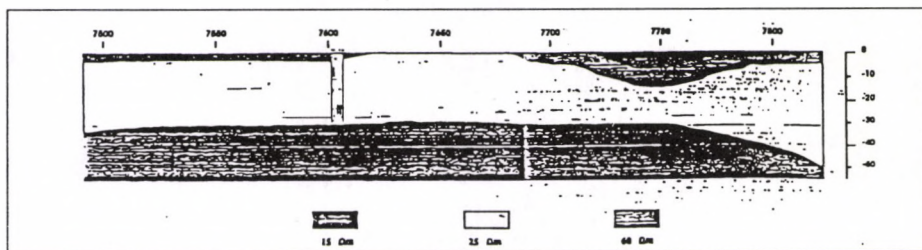
Vitatott azonban ezen vetők kvarter kori aktivitásának kérdése, és így természetesen nem tisztázott az ismert vetők mai működésének lehetősége, sőt azon potenciális képességük („capability”) sem volt eleve kizárható, hogy felszínig hatoló elvetést hozzanak létre.

A kérdés tisztázására a Magyar Állami Eötvös Loránd Geofizikai Intézet geoelektromos méréseket végzett a kvarterkorú rétegek folytonosságának ellenőrzésére. Az ellenállásszelvények nyomvonalát úgy választották ki, hogy az É–D irányú szelvényeken ellenőrizhetőek legyenek a Kapos-vonallal párhuzamos törések, míg az ezekre nagyjából merőleges szelvények képet adjanak a Móri-árok törérendszerhez tartozó vetődésekről (14. ábra). A módszer alkalmazásának alapja az, hogy a vetődések rendszerint megváltoztatják a fajlagos ellenállások eloszlásának sima, nyugodt menetét, mert az elmozdulás miatt különböző ellenállású kőzetek kerülnek azonos szintre, és a vetősík mentén a kőzet szerkezetének változása, a tört, felmorzsolts zóna nagyobb folyadéktartalma is ellenállás-változást okozhat. A számos szondázási görbe egyikének kiértékelését a 15. ábra, a mérésekből becsült ellenállás eloszlását az egyik szelvény mentén a 16. ábra mutatja be.



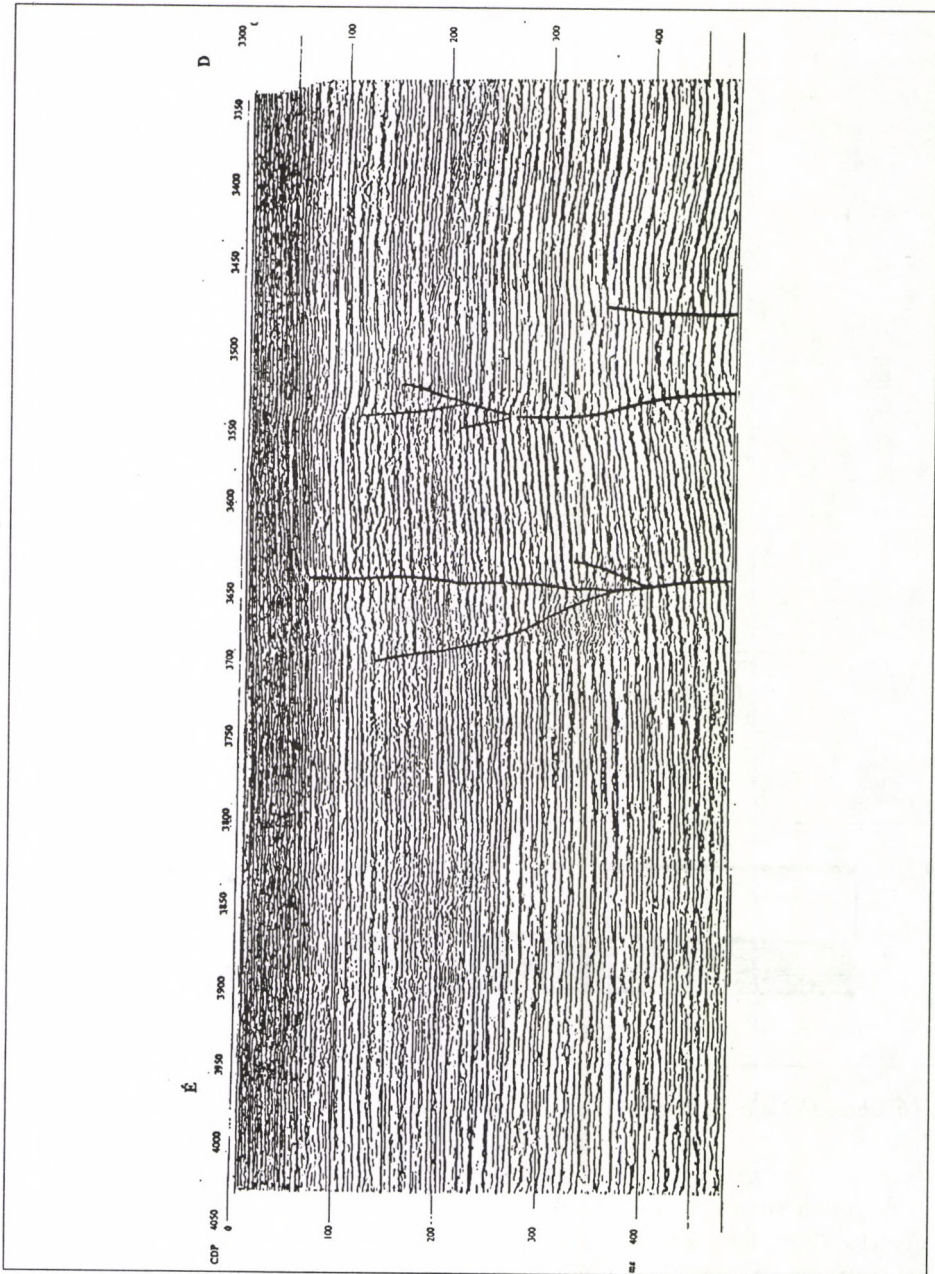


15. ábra. Kiértékelt geoelektromos szondázási görbe.  
A vízszintes tengelyen az ellenállás logaritmusa,  
a függőleges tengelyen  $AB/2$  logaritmusa szerepel



16. ábra. Példa a Paks környékén mért ellenállásszelvényekre, melyekkel a változások  
mintegy 60 méter mélységig voltak nyomozhatók

A geoelektromos szelvények „gyanús” helyeit földradarral is vizsgálták. Végül a földradar-szelvényeken kijelölt zavarzónákat 2 méter mélységű árkokkal is megvizsgálták. Ezek hossza ugyan a teljes geoelektromos szelvényrendszer hosszának csak 2,5%-a volt, de megnyugtatónak mondható, hogy egyetlen helyen sem találtak fiatal mozgásra utaló nyomokat.



17. ábra. Kiértékelt sekélyszeizmikus szelvény.  
A jól látható, a szelvényen bejelölt vetődés nem hatol a felszínig



A döntő bizonyítékot a szeizmikus mérések szolgáltatták. Az 1994 októberében a Dunán végzett vízi szeizmikus mérések a paksi atomerőmű 15 km-es környezetében a Duna alatti üledékösszletről nyújtottak képet közvetlenül a mederfenéktől több mint 500 méteres mélységig. A mérések célja a Dunát harántoló vetős szerkezetek részleteinek tisztázása volt. Az értelmezéshez felhasználták szárazföldi sekélyszeizmikus szelvények újra feldolgozott változatait is.

A szerkezetek kijelölése megbízhatóan elvégezhető volt. Megerősítették az erőműtől délre haladó K–ÉK irányú fővetőt, valamint egy másik, az erőmű közvetlen közelében húzódó É–K irányú vető létezését. A paksi telephely körzetében megismert vetők azonban a legfiatalabb, dunai folyami hordalékokból álló és 20–60 m vastagságot elérő, felszíni rétegösszletet láthatóan nem érintik, azaz a vetők nem hoztak létre felszínig hatoló, az alkalmazott nagy felbontású szeizmikus módszerekkel leképezhető elmozdulásokat. A 17. ábra egy ezt illusztráló kiértékelt szeizmikus szelvényt mutat be. A megállapítás a dunai hordalékok által képviselt idő-intervallumra érvényes. A „capability” kizárása nem jelent automatikusan állásfoglalást a mai aktivitás kérdésében, mert a rideg kéregben bekövetkező földrengés nem feltétlenül hoz létre felszínig hatoló törésvonalat. Nem zárható ki, hogy a vető ma is aktív, elhanyagolhatóan kicsi viszont annak a valószínűsége, hogy földrengések felszínig hatoló, számottevő mértékű elvetést hozzanak létre.

## Összefoglalás

A számos ok közül, melyek a környezetvédelmet és természetvédelmet szükségessé teszik, a legfontosabb az, hogy ez az emberiség túlélésének kulcsa. Az ember és természet azonos lényegűek, a természet törvényei tartósak, megváltoztathatatlanok. A túlélés érdekében az embernek együtt kell működnie a természettel. Abba kell hagynia a Föld erőforrásainak kizsákmányolását, és el kell kezdenie egy ésszerű, önmagát megújító működést. Ezeket az elveket követve az emberi élet még hosszú ideig fennmaradhat. Ha a Földet már nem a kertünknek, hanem szeméttárolónak tekintjük, előbb-utóbb elpusztítjuk önmagunkat.

A civilizáció fejlődése során az emberiség egyre fokozódó mértékben hasznosította a Föld anyagain. A 18. század óta a fosszilis energiahordozók bőséges energiát biztosítottak. Lényegében ez tette lehetővé az ipari forradalom kibontakozását. Az elsődleges energiahordozók, a jó minőségű érclelőhelyek és más szükséges ásványinyersanyag-lelőhelyek megtalálása egyre nehezebb, a rosszabb minőségűek hasznosításához bőséges energia kell. A következő évtize-

dekben az olaj-, szén- és gázkutatás mellett fontos az alternatív energiaforrások hasznosítása is.

Az emberi társadalom a hamis látszat ellenére nem egyre kevésbé, hanem egyre jobban függ a véges méretű Föld törékeny ökológiai rendszerének számunkra kedvező működésétől. Az erőforrások végesek, a cselekvés tere korlátozott. A károkozás lehetősége igen nagy, a kár elhárítása rendkívül költséges, sokszor lehetetlen. Az emberi életkörülményeket döntően fogja befolyásolni az, hogy mennyit tudunk, és ismereteinket hogyan tudjuk hasznosítani. Pontosabban kell ismerni a folyamatokat, a beavatkozás következményeit, előre fel kell mérni, ki kell számítani a lehetséges hatásokat. Emiatt a tudomány nemcsak belső értékei miatt lényeges számunkra, hanem a túlélés egyik fontos eszköze is.

A környezettudomány szintetizáló, művelésében szinte valamennyi klasszikus tudományágnak mással nem helyettesíthető szerepe van. Nem versengeni kellene a szűkös forrásokért, hanem együttműködni a feladatok valódi megoldása érdekében. A környezettudomány el nem hanyagolható része a földtudományok nagy családjá. Ezen belül környezetünk állapotának felmérésében, illetve védelmének biztosításában fontos szerepe van a geofizikai módszereknek. Ezt néhány példával és a földrengés-veszélyeztetettség meghatározására végzett vizsgálatok bemutatásával illusztráltam.

Bár a környezeti geofizikáról adtam valamivel részletesebb képet – hiszen ez saját működési területem –, tudatában vagyok annak, és hangsúlyozni is szeretném, hogy a földtudományok más területei nem kevésbé fontosak, és művelésükre éppen olyan nagy szükség van. Természetesen fokozottan érvényes ez a megállapítás más tudományágakra is, legyenek azok akár természet-tudomány vagy a társadalomtudomány területéhez sorolt diszciplínák. A jövő feladatainak megoldásához a tudás és a tudományos kutatás mellett tanításra és nevelésre, a versengés és nyereszkesedés helyett együttérzésre, segítőkészségre, a propaganda helyett igazmondásra és közösen végzett, kitartó munkára van szükség.



## Irodalom

- Bolt, B. A., 1978: *Earthquake (a primer)*. W. H. Freeman, San Fransisco.
- Chi-Yu King, 1992: Earthquake prediction techniques. In: *Encyclopedia of Earth System Science*, Vol. 2. pp. 111–117. (Editor in chief: W.E.Nierenberg ), Academic Press.
- Coppersmith, K. J. and Youngs, R. R., 1986: *Capturing uncertainty in probabilistic seismic hazard assessments within intraplate tectonic environments*. Proc. 3rd. U. S. Nat. Conf. Earthq. Engg., Vol. 1: 301–312.
- Cornell, A. C. 1968: Engineering seismic risk analysis. *Bull. Seism. Soc. Am.* 58 (5): 1583–1606.
- Council of Europe, 1991: *Earthquake prediction: state-of-the-art*. Conclusions of the Conference (Strasbourg, France, 15–18 October, 1991).
- Crowther, J. G.: *Science in Modern Society*. 1967. The Cresset Press. London
- Czelnai R., 1997: Légkör és óceán. (Nem ismerjük a Földet.) *Magyar Tudomány*, CIV: 1163–1176.
- Esteva, L., 1976: Seismicity, 6. fejezet. In: Lomnitz, C. és Rosenblueth (szerkesztők): *Seismic risk and engineering Decision*. Elsevier, Amsterdam.
- Gutenberg, B. and Richter, C. F., 1956: Earthquake magnitude, intensity, energy and acceleration. *Bull. Seism. Soc. Am.*, 46: 105–145.
- Hall, D. H., 1976: *History of the Earth Sciences during the Scientific and Industrial Revolution*. Elsevier, Amsterdam.
- IAEA 1984: Earthquake Resistant Regulations: A World List. International Association for Earthquake Engineering.
- ICOLD (International Commission on Large Dams), 1987: *Selecting seismic parameters for large dams*. Bulletin 72, Paris.
- Meskó A., 1988: *Bevezetés a geofizikába*. Bp. Tankönyvkiadó.
- Meskó A., 1994: Earthquakes and landslides. In: *Natural disasters in Hungary, National Report for United Nations*, (Szerkesztő: Cs. Nemes).
- Price, D. J. de Solla, 1965: *Little science, big science*. Columbia Univ. Press. New York Univ. Press. Cambridge.
- Réthly, A., 1952: *A Kárpát medence földrendései 455 és 1918 között*. Akadémiai Kiadó, Budapest.
- Runcorn, S. K., 1967: *International Dictionary of Geophysics*. Pergamon Press.
- World Data Centre A for Solid Earth Geophysics. 1979. Manual of Seismological Observatory Practice, Report SE-20, U. S. Dept. Commerce, ed. P.L. Willmore, IGS, Edinburgh.
- Sieferle, R. P., 1982: *Der unterirdische Wald. Energiekrise und Industrielle Revolution*. Beck, München.
- Sieferle, R. P.: The energy system – a basic concept of environmental history. In: P. Brimblecombe and C. Pfister (Eds.): *The Silent Countdown*. 1990 p. 9–20. Springer, Berlin.
- Smith, D. G. (szerkesztő): *The Cambridge Encyclopedia of Earth Sciences*. 1981. Cambridge.
- Tóth T.–Horváth F., 1997: Neotektonikus vizsgálatok nagyfelbontású szeizmikus szelvényezéssel. In: Marosi S.–Meskó A. (szerk.): *A Paksi Atomerőmű földrendés-biztonsága*. Budapest, Akadémiai Kiadó, 123–152.
- Zsíros, T., Mókus, P. and L. Tóth, 1989: *Hungarian Earthquake Catalogue (456–1986)*. Hungarian Academy of Sciences, Budapest.
- Zsíros T., 1990: Paks földrendés-kockázatának becslése a szeizmicitás alapján. *Magyar Geofizika*, 31: 124–132.





Bárdossy György

az MTA rendes tagja

# A RADIOAKTÍV HULLADÉK HAZAI ELHELYEZÉSÉNEK FÖLD- TUDOMÁNYI ALAPJAI

Elhangzott 1998. november 3-án

Az elmúlt évben, 1997-ben hazánk villamosenergia-termelésének 43,1%-át szolgáltatta a paksi atomerőmű. Ez egyben leggazdaságosabb hazai energiaforrásunk. Vajda György akadémikus (1998) értékelése szerint az atomenergia további évtizedeken át legfontosabb energiaforrásunk marad. Ehhez azonban az atomerőműnek a gazdaságosságon túl három biztonsági követelménynek is eleget kell tennie:

A) *Balesetmentes működés.* Ez a követelmény az atomerőmű termelésének megkezdése óta teljesült. A Nemzetközi Atomenergia-ügynökség (továbbiakban NAÜ) értékelése szerint a paksi atomerőmű a világ legbiztonságosabb atomerőművei közé tartozik. További balesetmentes működéséhez tehát megalapozott remény fűzhető.

B) *A normális üzemmenet minimális mértékben terhelje az atomerőmű környezetét többletsugárzással.* Az 1988 óta folyamatosan működő megfigyelő- és mérőrendszer észlelései szerint a többlet-sugárterhelés az ország területén észlelhető háttersugárzásnak mintegy 1 ezrelékét teszi ki, tehát elhanyagolható nagyságú.

C) *Biztosítani kell az atomerőműben keletkező radioaktív hulladékok biztonságos elhelyezését.* Ez székkfogalom témája. Megjegyzem, hogy a paksi atomerőmű

mellett a Központi Fizikai Kutató Intézet kísérleti reaktorában, valamint egyes egészségügyi intézményekben is keletkeznek radioaktív hulladékok, amelyek elhelyezéséről szintén gondoskodni kell.

## Általános alapismeretek

A NAÜ 1994-ben ajánlást adott ki a radioaktív hulladékok osztályozására. Ebben kis és közepes, valamint nagy aktivitású radioaktív hulladékokat különböztetnek meg. (*Aktivitás* alatt az időegységenként bekövetkező atombomlások számát értjük. Egysége 1 Bq /Becquerel/  $1 \text{ Bq} = 1 \text{ átalakulás/s.}$ )

Az osztályozás alapja a radioaktív hulladékok *hőteljesítménye*. Amennyiben ez  $2 \text{ kW/m}^3$ -nél nagyobb, úgy nagy aktivitású, amennyiben ennél kisebb, úgy kis és közepes aktivitású hulladékokról beszélünk. A kis és közepes aktivitású hulladékokat két alcsoportra osztották:

A) *Rövid élettartamúak* (nemzetközi jelölésük LILW-SL). Ezekben a mértékadó radioizotópok felezési ideje 30 évnél rövidebb. Ezekben a hulladékokban a hosszú élettartamú radionuklidok aktivitása nem lehet  $400 \text{ Bq/g}$ -nál nagyobb.

B) *Hosszú élettartamúak* (jelölésük LILW-LL). Ezekben a mértékadó radionuklidok felezési ideje 30 évnél hosszabb.

Figyelmet érdemel, hogy az 1989-ben kiadott és máig érvényben levő magyar szabvány *felületi dózisteljesítmény alapján* különbözteti meg a kis és közepes, valamint a nagy aktivitású hulladékokat. A nagy aktivitású hulladékoknál ez  $10 \text{ mGy/óránál}$  nagyobb.  $1 \text{ Gy (Gray)} = 1 \text{ J/kg}$ .

A NAÜ ajánlásai szerint a kis és közepes aktivitású hulladékokat a felszínen vagy a felszín alatt kis mélységben ( $< 200$  méter) célszerű elhelyezni. Az ellenőrzött tárolási idő a leghosszabb felezési idejű radioizotópok felezési idejének tízszereséig tart. (A  $^{137}\text{Cs}$  és a  $^{90}\text{Sr}$  felezési ideje 30, ill. 29 év). A magyar előírás ennek a kétszeresével, tehát 600 évvel számol. Franciaországban és néhány más országban már működnek felszíni tárolók, más országokban a kutatások előrehaladott stádiumban vannak. Az utóbbi években a felszín alatti tárolók létesítése került előtérbe, nem annyira szakmai, mint inkább politikai megfontolások miatt.

Nagy aktivitású hulladékokat nagyobb veszélyességük miatt csak mélyen a felszín alatt (300–800 méter) szabad elhelyezni. A nagy aktivitású hulladékok egy része kiégett fűtőelemekből áll, másik része a leszerelésre kerülő atomerőművekből származik. A kiégett fűtőelemeket előbb 40–80 éven át az atomerőművek területén ún. átmeneti tárolókban helyezik el. Ez alatt veszélyes aktivitásuk egy részét elvesztik, továbbá hőtermelésük is jelentősen lecsökken. Csak ezután kerülnek végleges elhelyezésre a mélységi tárolóba. A nagy aktivitású



hulladékok ajánlott tárolási ideje kb. 10 000 év, radioizotópjaik hosszú felezési ideje miatt.

A radioaktív hulladékokat háromszoros gátrendszerrel különítik el a bioszférától:

A) *Műszaki gátak.* Acélhordók, konténerek ezek, amelyekben a hulladékot elhelyezik. Olyan anyagból készülnek, amely a korróziónak hosszan ellenáll. Újabban a hulladékot kvarchomokkal keverik és üveggé olvaszják. Ez a *vitrifikáció*, ami méginkább megnehezíti a radionuklidok kiszabadulását.

B) *Bányaműszaki gátak.* A tároló bányászati létesítményei ezek: a vágatok és silók, valamint ezek falai. A vágatfalak és a konténerek közötti teret olyan izolálóanyaggal töltik ki, amely jól megköti a radionuklidokat. Ilyen pl. a bentonit és a különböző zeolitok. Egyes helyeken ezen felül a tárolót közvetlenül körülvevő kőzet átitatásával kísérleteznek a vízáteresztő képesség csökkentése, ill. az izotópmegkötő képesség növelése céljából.

C) *Földtani gátak.* Azok a földtani képződmények ezek, amelyekben a hulladéktárolót elhelyezik. Ennek kedvező kőzettani, ásványtani, hidrogeológiai, geokémiai és izotópmegkötő tulajdonságai azok, amelyek a tárolóból kiszabadult radionuklidoknak a bioszférába való visszajutását megakadályozzák. Különösen fontosak az izotóptranszportot akadályozó geokémiai folyamatok, úgymint a redoxpotenciál és pH-változások, a hidrolízis, a komplexképződés, a kolloid vegyületek képződése, a szorpciós folyamatok és nem utolsósorban bizonyos mikrobiológiai folyamatok.

Az elmúlt évtizedekben a hulladéktárolók telephelykutatásának alábbi elvi sorrendje alakult ki:

1. *Áttekintő szakirodalmi tájékozódás.* A napjainkra létrejött számítógépes szakirodalmi lekérdező rendszerek segítségével ez a feladat könnyen megoldható.

2. *Telephelykiválasztás (site selection program).* Ez a tevékenység nagy térségek – kisebb országok esetében az egész ország – területének áttekintő értékelésével indul. A kizárandó területek egész sorát kell itt figyelembe venni, pl. lakott területek, üdülőkörzetek, utak, hidak, katonai és ipari létesítmények, ivóvízbázisok, működő bányák stb. Politikai okokból rendszerint egy több kilométeres határ menti sávot is kizárnak a felmérésből. A fennmaradó területeket alkalmasságuk szerint rangsorolják. Ennek alapján, valamint a minél rövidebb szállítási útvonal igényét figyelembe véve jelölik ki a kisebb *régiókat*, melyeken nagyobb részletességgel folytatják a kutatásokat. A régiókon belül általában egy-egy közigazgatási egységre kiterjedő *potenciális objektumokat* jelölnek ki, majd a helyi lakosság beleegyezésének alapján állítanak fel továbbkutatási rangsort. A kutatás 1–4 legkedvezőbbnek látszó objektumon folytatódik azért, hogy megghiúsulás esetén mindig maradjon alternatíva a továbbkutatásra.



A legkedvezőbbnek látszó objektumon indul meg a tároló tényleges telephelyének kiválasztása, amikor is újból 3-5 alternatívával dolgoznak. A telephelyek mérete a hulladékfajtától (kis, közepes, nagy aktivitású) és az elhelyezendő hulladék mennyiségétől, valamint a helyi földtani adottságoktól függ, rendszerint nem nagyobb  $1 \text{ km}^2$ -nél.

3. *Telephelyjellemzés (site characterization program)*. Az elmúlt évtizedek során közmegegyezés született azokról a legfontosabb földtani, ásványtani, kőzet-tani, geokémiai, hidrogeológiai, tektonikai, geofizikai és kőzetmechanikai ismeretekről, amelyeket e kutatási fázisban megfigyelni, mérni és kiértékelni kell. Fontos szempont e tulajdonságok térbeli és időbeli változékonyságának megismerése. Geostatistikai módszerekkel ezek hatástávolságát is meg lehet határozni. A nagy aktivitású hulladékok nagyobb veszélyessége és a tárolási idő hosszabb volta miatt az utóbbi években egyre több helyen alakítottak ki ún. *mélységi laboratóriumokat* (URL), melyekben több éven, sőt évtizedeken át is mérni lehet a legfontosabb telephelyjellemzőket. Az is kiderült továbbá, hogy fúrásokkal igen nehéz a zavart tektonikai zónák pontos megismerése és megmintázása. Erre sokkal alkalmasabbak a mélységi laboratóriumok vágatai.

A telephelyjellemzés első szakaszában az adatgyűjtésen és mérésen van a fő hangsúly, a második szakaszban az összefoglaló kiértékelés kerül előtérbe. Az első szakasz végét többnyire egy olyan összefoglaló jelentés képezi, amelyben a telephely alkalmasságáról kell állást foglalni, arról, hogy a telephely a továbbkutatásra alkalmas. A jelentés elkészítésének előfeltétele a felgyűlt sok adat miatt egy olyan *számítógépes adatbázis* kialakítása, amely egy szintetizáló kiértékelést lehetővé tesz. E kiértékelés során matematikai statisztikai módszereket is széles körben alkalmaznak. A kapott eredmények térbeli ábrázolását számítógépes térinformatikai módszerek segítik elő. A telephelyjellemzést egy összefoglaló *kutatási zárójelentés* fejezi be. Ebben a kiértékelés különböző térmodellek kialakításával bővül. Egy ilyen térmodell például a háromdimenziós talajvízáramlási modell.

4. *Biztonsági elemzés (safety analysis)*. Az adott telephelyre vonatkozó biztonsági elemzés már a telephely-jellemzés szakaszában megindul, és annak befejezésével teljeseedik ki. Az alábbi részekből áll (PAGIS 1988):

5. I. A legfontosabb telephelyjellemző adatok.

II. Hidrogeológiai, geokémiai és izotóptranszport modellek bemutatása.

III. Termokémiai elemzés. Ennek során azt számítják ki, hogy a radio-nuklidok hőtermelése következtében mennyire fog megnőni a tárolás során a tároló hőmérséklete. Meghatározzák a legmagasabb megengedhető hőmérsékletet és annak idő-intervallumát. Az ezt meghaladó hőmérséklet károsíthatja a tároló műszaki létesítményeit és izotópmegtartó képességét.



IV. Bizonytalanságelemzés (uncertainly analysis). Ez a felsorolt tulajdonságok meghatározásának bizonytalanságát értékeli a matematikai statisztika módszereivel. Ennek során többnyire 95%-os konfidenciaszintet alkalmaznak.

V. Scenario-elemzés. Azt vizsgálják, hogy miként reagál a tároló és a befogadó földtani képződmény az éghajlat, a talajvízszint, a talajvízáramlási rendszer és az erózió megváltozására. Milyen hatásokat okozhatnak továbbá földrengések és új töréses elmozdulások a tárolóban? A nagy aktivitású hulladékok hosszú tárolási ideje miatt véletlen emberi behatolás következményeit is értékelni kell.

VI. Érzékenységvizsgálat, amellyel a főbb tulajdonságok megváltozásának hatását vizsgálják egyenként, és ennek alapján fontossági sorrendet határoznak meg a hatások nagysága szerint.

VII. Kockázatelemzés. Ennek során kiszámítják a tároló létesítésével kapcsolatos és a tárolás teljes időtartamára kiterjedő kockázatokat, ami a tárolótérségében élő lakosságot érintheti.

Más irányú kockázatelemzésekhez hasonlóan determinisztikus és sztochasztikus módszereket alkalmaznak. E számításoknál is 95%-os konfidenciaszintet használnak. A kockázatelemzésnél nem határozzák meg külön-külön az egyes változók biztonsági kritériumait, hanem az alábbi összesítő biztonsági kritériumokat kell betartani:

- *Dóziskorlát.* Ez azt jelenti, hogy a tárolás teljes ellenőrzött időtartama alatt a lakosság egyedeit maximum  $0,1 \text{ mSv/év}$  többlet-sugárterhelés érheti. ( $1 \text{ Sv/sievert} = 1 \text{ J/kg}$ ). Ehhez tudni kell, hogy hazánk területén a természetes radioaktív háttérsugárzás átlagosan  $2,4 \text{ mSv/év}$  (Szabó 1992).
- *Kockázati korlát.* A tárolóból származó és a bioszférát elérő többletsugárzás következtében a hulladéktároló térségében maximum  $10^{-5}/\text{év}$  maradandó egészségkárosodás, ill. haláleset következhet be. Ez a szám 100 000 főre évente egy ilyen esetet jelent.

Rendkívül szigorú megkötések ezek, és joggal kérdezheti bárki: eleget lehet-e ezeknek tenni. A másik kérdés, ami kezdettől fogva nyugtalanította a szakembereket az, hogy extrapolálhatók-e néhány éves vagy évtizedes mérési eredmények több száz, ill. több ezer évre előre. Mi a realitása így a kockázatelemzéseknek? E kérdésekre a *természetes földtani analógiák* megtalálásával sikerült megnyugtató válaszokat kapni. Természetes sugárforrások olyan feldúsulásai ezek, melyek a földtörténet folyamán több millió, esetleg több százmillió évvel ezelőtt jöttek létre a földkéregben. Az elmúlt évtizedek során nyersanyagkutatói céllal számos ilyen radioaktív érctelepet fedeztek fel. Kiderült, hogy több közülük a mai napig környezetétől elzárva maradt, más szóval

radioizotópjaik a felszíni bioszférát nem fertőzték meg. Kézenfekvő volt az a gondolat, hogy meg kell ismerni azokat a földtani gátakat, amelyek ezt az izolációt lehetővé tették, és a jövőben hasonló földtani képződményeket, ill. helyszíneket kell a radioaktív hulladékelhelyezésre megkeresni.

Ilyen példa a kanadai Saskatchewan tartományban, a Cigar-Lake közelében levő hatalmas uránérctelep, amely 1,3 milliárd évvel ezelőtt jött létre, és a felszín alatt 400–500 méter mélységben helyezkedik el. A telepet körülvevő földtani gátnak köszönhetően ez a telep a bioszférától mindmáig elzárva maradt. Az elmúlt évek folyamán nemzetközi együttműködéssel tanulmányozták a földtani gát tulajdonságait. Megállapították, hogy az uránérctelepet körülvevő agyagköpeny izotópmegkötő képessége, továbbá a talajvíz kedvező Eh-ja és pH-ja akadályozta meg a radioizotópok felszínre jutását (Cramer, Smellie 1994). Ha tehát a természetes izoláció évmilliók százain át többmillió tonnás radioaktív érctelepet el tudott zárni a bioszférától, akkor a földtani analógiák megfelelő felhasználásával reális esélyünk van aránytalanul kevesebb sugárzó anyagnak maximum 10 000 éven át történő biztonságos elzárására. Ez véleményem szerint a radioaktív hulladék elhelyezésének elvi, tudományos alapja. Még ennél is meggyőzőbb példa található Gabonban, ahol a geológusok egy spontán beindult és kb. fél millió évig tartó láncreakció nyomaira bukkantak anélkül, hogy ennek bomlástermékei a bioszférát érdemben szennyezték volna (Vajda Gy., 1991).

A természetes analógiák fontosságára való tekintettel az SCK CEN az Európa Tanács keretében kutatási tervet indított el *Natural Analogue Study Project* névvel, elsősorban az agyagkőzetek tanulmányozására (De Craen et al. 1998 draft proposal). Rendkívül fontosnak tartom, hogy ebben a nemzetközi munkában hazánk is részt vegyen.

## A nemzetközi tapasztalatok összefoglalása

A nagy aktivitású hulladékok tárolóra vonatkozó nemzetközi tapasztalatokat, követelményeket az alábbi pontokba lehet összefoglalni:

1. A befogadó képződmény minimális méretei. Ugyanis hiába jó a képződmény ez irányú tulajdonságai, ha méretei elégtelenek. Mai ismereteink szerint legalább 1 km<sup>2</sup> alapterület és legalább 100 méter vastagság kell ahhoz, hogy egy képződmény tároló befogadására alkalmas legyen.

2. Az alkalmasságot meghatározó tulajdonságok a kiszemelt térrészen belül legyenek minél homogénebbek. Természetes, hogy egy földtani képződmény sohasem lehet teljesen homogén, de fontos követelmény, hogy minél kevesebb változás legyen a térrészen belül. Matematikai statisztikai módszerekkel



(ANOVA, MANOVA, One-way analysis of variance stb.) ez a követelmény numerikusan értékelhető.

3. Fontos követelmény a mértékadó tulajdonságok stabilitása, állandósága a külső körülmények megváltozásával szemben. A korábbiakban ismertetett scenario-elemzés során éppen ezt a követelményt vizsgálják. Természetesen a tárolóban fellépő változásokkal, pl. hőhatással szemben is minél stabilabb képződményekre van szükség.

4. A legfontosabb követelmény a lehető legnagyobb *radioaktív izolációs képesség*. Ennek legfontosabb összetevői a következők:

- a befogadó képződmény rossz vízvezető képessége;
- kedvező talajvízáramlási rendszer, vagyis a tárolóból esetleg kiszabaduló radionuklidok vizes oldatait minél hosszabb pályán és minél hosszabb idő alatt érhessek el a bioszférát;
- a talajvíz pH-ja és Eh-ja olyan legyen, hogy az csökkentse a radionuklidok oldhatóságát;
- a befogadó képződmény rendelkezzen minél nagyobb radionuklid-megkötő képességgel, amit elsősorban agyagásványok, zeolitok és más, nagy fajlagos felületű ásványzemcsék jelenléte segíthet elő;
- a befogadó képződményben a radionuklidok molekuláris diffúziója minél gyengébb és lassúbb legyen;
- az esetleges mikrobiológiai folyamatok is akadályozzák a radionuklidok továbbterjedését.

5. A befogadó képződmény hővezető képessége minél nagyobb legyen. A nagy aktivitású hulladékok hőteljesítménye igen nagy, de az idővel exponenciálisan csökken. Ez is egyik oka a korábbiakban említett, 40–80 éven át tartó átmeneti tárolásnak. Számítások szerint sűrűn elhelyezett hulladék esetén a föld alatti tárolás első ötven évében a tároló hőmérséklete 150–300 °C-ra is növekedhet, ami károsíthatja a tároló műszaki létesítményeit (Eriksson 1991). Ezért ma már a műszaki és földtani adottságok függvényében előre meghatározzák az adott tárolóban megengedhető legnagyobb hőmérsékletet.

6. Fontos követelmény a tároló képződmény minél kisebb tektonikai zavartsága. E tekintetben a töréses elmozdulások a legfontosabbak, különösen, ha tértágulások elmozdulásokról van szó. A több méter vagy több tíz méter vastag töréses zónákban nagyságrendekkel megnőhet a talajvíz áramlásának sebessége és vele együtt a radionuklidok migrációja. Ezért egyértelműen meg kell határozni, hogy a vizsgált térrészen belül zártak (kitöltöttek) vagy nyitottak-e a tektonikus repedések és a vastagabb törészónák. Tektonikailag zúzott zónákban a befogadó képződmény kőzetmechanikai tulajdonságai is leromolhatnak, ami a tároló bányászati kialakítását fogja nehezíteni. Végül az is igen



fontos, hogy napjainkban is folytatódó tektonikai elmozdulások ne veszélyeztessék a tároló épségét. Ennek megállapítására eddig főként neotektonikai, geomorfológiai és geofizikai módszereket használtak. Ezeket napjainkban a korszerű GPS-hálózat (Global Positioning System) kiépítésével egészítik ki.

7. A tároló térsége minél kevésbé legyen földrengésveszélyes, hiszen a földrengések a tárolók felszíni létesítményeit veszélyeztethetik. Fontos továbbá a befogadó képződmény minél kisebb szeizmikus érzékenysége. A több száz méter mélyen levő tárolókra ugyanakkor a földrengések alig jelentenek veszélyt.

8. A befogadó képződmény minél kedvezőbb kőzetmechanikai és bányaműszaki tulajdonságokkal rendelkezzen, pl. jó állékonyság, kedvező szilárdságtani tulajdonságok, minimális duzzadóképeség stb.

9. Könnyű bányászati hozzáférhetőség és a felszíni létesítmények kis veszélyeztetettsége földcsuszamlásokkal vagy árvizekkel.

A felsorolt követelmények közül egyértelműen a radioaktív izolációs képesség a legfontosabb, majd ezután következnek a kedvező termikus tulajdonságok. A kis és közepes aktivitású hulladékok tárolóira is ugyanezek a szempontok érvényesek, de jóval kisebb aktivitásuk és hőteljesítményük miatt a követelmények kevésbé szigorúak.

Fontos, nemzetközileg elfogadott szempont az, hogy a felsorolt követelményeket nem kell egyenként számszerűsíteni. A követelmények együttes hatása a döntő, amit az előzőekben ismertetett dóziskorlát és kockázati korlát számszerűsít. További nemzetközi tapasztalat az, hogy a kutatásokat nem szabad egyetlen potenciális telephelyre korlátozni, hanem tartalék telephelyeket is ki kell jelölni előre nem látott akadályok esetére.

Az eddig leggyakrabban számításba vett befogadó kőzeteket az 1. táblázat tartalmazza. Leggyakoribb a *gránit*, nagy területi kiterjedése, szilárdsága, stabilitása és viszonylagos homogenitása miatt. Ugyanakkor a gránit csak korlátozott izotópmegkötő képességgel rendelkezik. Különbséget kell tenni továbbá az ősi pajzsok tektonikailag nyugodt, hatalmas gránittömegei és az orogén övek jóval kisebb kiterjedésű és erősebben tektonizált gránitjai között. A gránit után az *agyagkőzetek* következnek a puha, plasztikus agyagtól az agyagkővön át az agyagpaláig, továbbá az agyagmárgáig. Kedvező tulajdonságai a rossz vízvezető képesség és a nagy izotópmegkötő képesség. Emiatt az utóbbi években egyre többre értékelik az agyagkőzeteket a kérdés szakemberei. A harmadik leggyakoribb csoport a *kőso*, akár zavartalan kősoarétegek, akár sódóмок formájában. Kedvező hidrogeológiai és plasztikus tulajdonságai miatt kedvelik. Az utólagos hatásokra azonban a többi szilárdabb kőzetnél érzékenyebbek. Az Egyesült Államok Nevada államában levő Yucca Mts.-ban épülő mélységi tároló befogadó kőzete *zeolitos vulkáni tufa*, amely kiemelkedően jó izotópmegkötő



tulajdonságokkal rendelkezik. Hátrányosak viszont a neotektonikai mozgások és a képződmény korlátozott stabilitása.

Eddig egyetlen nagy aktivitású hulladéktároló kutatását sem fejezték be, ami érthető, ha figyelembe vesszük, hogy az első atomerőművet 1954-ben a volt Szovjetunióban (Ogyinszk) helyezték üzembe. Az atomerőművek számával együtt nőtt a telephelykutatások száma és mérete. A kiégett fűtőelemek általánosan elfogadott átmeneti tárolása miatt még bőven van idő a telephelykutatás befejezésére és a tárolók megépítésére. A szerteágazó munkák miatt egyre fontosabb viszont a nemzetközi együttműködés és a tapasztalatok kölcsönös megismertetése. Ez a hazai telephelykutatásnak is elsőrendű érdeke.

1. táblázat

Radioaktív hulladékelhelyezésre eddig kiválasztott kőzetek

Argentína	gránit
Belgium	agyag (oligocén)
Cseh Köztársaság	gneisz
Dél-afrikai Köztársaság	gránit
Egyesült Államok	zeolitos vulkáni tufa, gránit, kősórétegek
Finnország	gránit
Franciaország	gránit, agyag, agyagpala, agyagmárga, kőso
Hollandia	kőso
Japán	gránit, agyagkő
Kanada	gránit
Kína	gránit, agyagkő
Nagy-Britannia	agyag, vulkáni tufa
Németország	kőso, vasérc
Olaszország	agyag, agyagmárga
Oroszország	gránit, kőso
Spanyolország	gránit, agyag, kőso
Svájc	gránit, márga, agyag
Svédország	gránit, gneisz

## A paksi atomerőműben keletkező radioaktív hulladékok

A paksi atomerőműben 1988 óta állítanak elő villamos energiát négy VVER-440 típusú atomreaktorral. E tevékenység során – normális üzemmenet mellett – 1997-ben az erőműtől kapott tájékoztatás szerint  $119 \text{ m}^3$  fémhordókba tömörített, szilárd halmazállapotú, kis és közepes aktivitású radioaktív hulladék keletkezett. További  $275 \text{ m}^3$  kis és közepes aktivitású radioaktív iszap is létrejött, amit ún. sűrítmenytartályokban helyeznek el. E tartályok telítettsége 1997 végén 70%-os volt, ami a telephelykutató és -létesítés viszonylagos sürgősségét jelzi.

A kis és közepes aktivitású radioaktív hulladékok izotóp-összetételét és felezési idejét a 2. táblázatban mutatjuk be. A sugárvédelem és a tárolási idő szempontjából a  $^{90}\text{Sr}$  és a  $^{137}\text{Cs}$  radioizotópok a legfontosabbak.

2. táblázat

*A kis és közepes aktivitású hulladékok  
főbb radioizotópjai a paksi atomerőműben*

Izotóp	Felezési idő (év)
$^{58}\text{Co}$	0,2
$^{110}\text{Ag}$	0,7
$^{54}\text{Mn}$	0,9
$^{134}\text{Cs}$	2,1
$^{55}\text{Fe}$	2,7
$^{60}\text{Co}$	5,3
$^3\text{H}$	12,3
$^{90}\text{Sr}$	28,6
$^{137}\text{Cs}$	30,2
( $^{238}\text{Pu}$ )	(87,8)

Normális üzemmenet esetén a kiégett fűtőelemek jelentik az egyedüli nagy aktivitású hulladékot. Évente 400–440 kiégett fűtőelemet cserélnek le. Ezek a korábbiakban említett átmeneti tárolóba kerülnek. Államközi szerződés keretében a volt Szovjetunió, ill. a mai Oroszország eddig költségtérítés ellenében átvette a kiégett fűtőelemeket. 1997 végéig 1500 fűtőelemet szállítottak ki. Könnyen lehetséges, hogy ez a kiszállítás a jövőben nem lesz folytatható, ezért a nagy aktivitású hulladékok elhelyezéséről idehaza kell gondoskodni.



2020 után fokozatosan megindul az atomerőmű blokkjainak leszerelése. Ennek időrendje a lehetséges technikai fejlődéstől függően még bizonytalan. Annyi biztos, hogy a fent leírt üzemviteli hulladékokon felül ebben az időszakban jelentős mennyiségű leszerelési hulladék elhelyezéséről kell majd gondoskodni. Az atomerőmű illetékes szakembereitől kapott tájékoztatás szerint a leszerelés során 24–26 000 m<sup>3</sup> kis és közepes aktivitású, továbbá 2000–2200 m<sup>3</sup> nagy aktivitású hulladék elhelyezését kell biztosítani.

A paksi atomerőmű kiegészített fűtőelemeinek főbb radioizotópjait a 3. táblázatban mutatom be. Közülük a plutónium, a jód és a nikkel izotópjai jelentik az élővilágra a legnagyobb veszélyt. Ezeknek az izotópoknak a felezési ideje több százezer évig terjedhet.

3. táblázat

*A kiegészített fűtőelemek radionuklid-összetétele  
a paksi atomerőműben*

<sup>234,235,238</sup> U	uránium
<sup>238,239,240</sup> Pu	plutónium
<sup>241,243</sup> Am	americium
<sup>237</sup> Np	neptunium
<sup>14</sup> C	szén
<sup>36</sup> Cl	klór
<sup>63</sup> Ni	nikkel
<sup>129</sup> I	jód
<sup>134,137</sup> Cs	cézium
<sup>90</sup> Sr	stroncium
<sup>3</sup> H	hidrogén (trícium)

## A radioaktív hulladék hazai elhelyezésének törvényi és szervezeti keretei

A magyar törvényhozás 1996. december 10-i ülésén elfogadta az atomenergiáról szóló 1996/CXVI. számú törvényt. A törvény „Központi Nukleáris Pénzügyi Alap” létrehozását írja elő a radioaktív hulladékok kezelésének, továbbá a tárolóhelyek kutatásának, létesítésének és üzemelésének költségfedezetére. Ez az alap fedezi az atomerőmű leszerelési költségeit is. Az alap kezelője az Országos Atomenergia Hivatal (továbbiakban OAH). A befizetést az erőmű által

előállított villamos energia árában érvényesítik. A törvény értelmében 1998. július 1-vel létrejött a Radioaktív Hulladékokat Kezelő Közhasznú Társaság (továbbiakban RHKKT). Feladata a hulladékkezelés, a hulladéktárolók kutatása, létesítése, üzemeltetése, továbbá az atomerőmű leszerelésének irányítása. Említést érdemel még, hogy a hulladéktárolók földtani követelményrendszerét 1997-ben miniszteri rendelettel határozták meg. Ennek értelmében a földtani követelményrendszerrel kapcsolatos kérdésekben a Magyar Geológiai Szolgálat szakhatósági hozzájárulása szükséges.

A hulladékelhelyezés kutatási terveit és jelentéseit az RHKKT által létrehozott 8 tagú szakértői bizottság véleményezi. Döntéshozatalra három lépcsőben kerül sor: előbb a minisztériumok megbízottaiból álló szakbizottság, majd az Országos Atomenergia Bizottság és végül a Parlament szintjén.

## A hazai kis és közepes aktivitású hulladékok tárolóhelyének kutatása

Hazánkban e téren az érdemi kutatások 1976-ban kezdődtek el, amikor az ETV-ERŐTERV Intézet 18 potenciális telephelyre vonatkozóan végzett áttekintő vizsgálatokat. Ezek eredményeként *Püspökszilágyon* felszíni betonmedencés tárolót létesítettek korlátozott befogadóképességgel. Máig ez a tároló fogadja a nem atomerőművi (tudományos, ipari és orvosi) kis és közepes aktivitású radioaktív hulladékokat. 1983 és 1996 között hatósági engedéllyel a paksi atomerőmű is szállított ide kis aktivitású szilárd hulladékot.

A folytatódó országos kutatások során előbb *Magyaregregy* térsége merült fel, de ezt a lehetőséget a Baranya Megyei Tanács 1983-ban elvetette. Ezután az ETV-ERŐTERV *Ófalu* térségét javasolta kutatásra. 1984 és 1988 között számos vállalat és intézmény bevonásával földtani és geofizikai kutatások folytak itt felszíni tároló létesítése érdekében. A felvetődött ellenvélemények miatt ún. független szakértői bizottság alakult, amely 1988-ban szakmai érvekre hivatkozva elvetette a kutatások folytatását. Számos tárgyalás, vita és ellentmondó szakértői vélemény elhangzása után az akkori Népjóléti Minisztérium 1990-ben véglegesen elvetette az ófalui felszíni hulladéktároló tervét. Személyes véleményem szerint még ez a sikertelenül végződött kutatás is számos hasznos földtani, geofizikai, kutatásszervezési és tájékoztatási tapasztalatot hozott, amelyeket a későbbi kutatásoknál hasznosítani lehetett.

Az OAH kezdeményezésére 1992-ben több minisztérium és országos hatóság részvételével ún. „nemzeti projekt” indult a kis és közepes aktivitású hulladékok végleges elhelyezésére. A projektet két szakaszban kívánták megvalósítani: az első szakaszban a telephelyek kiválasztása volt a cél, a másodikban a



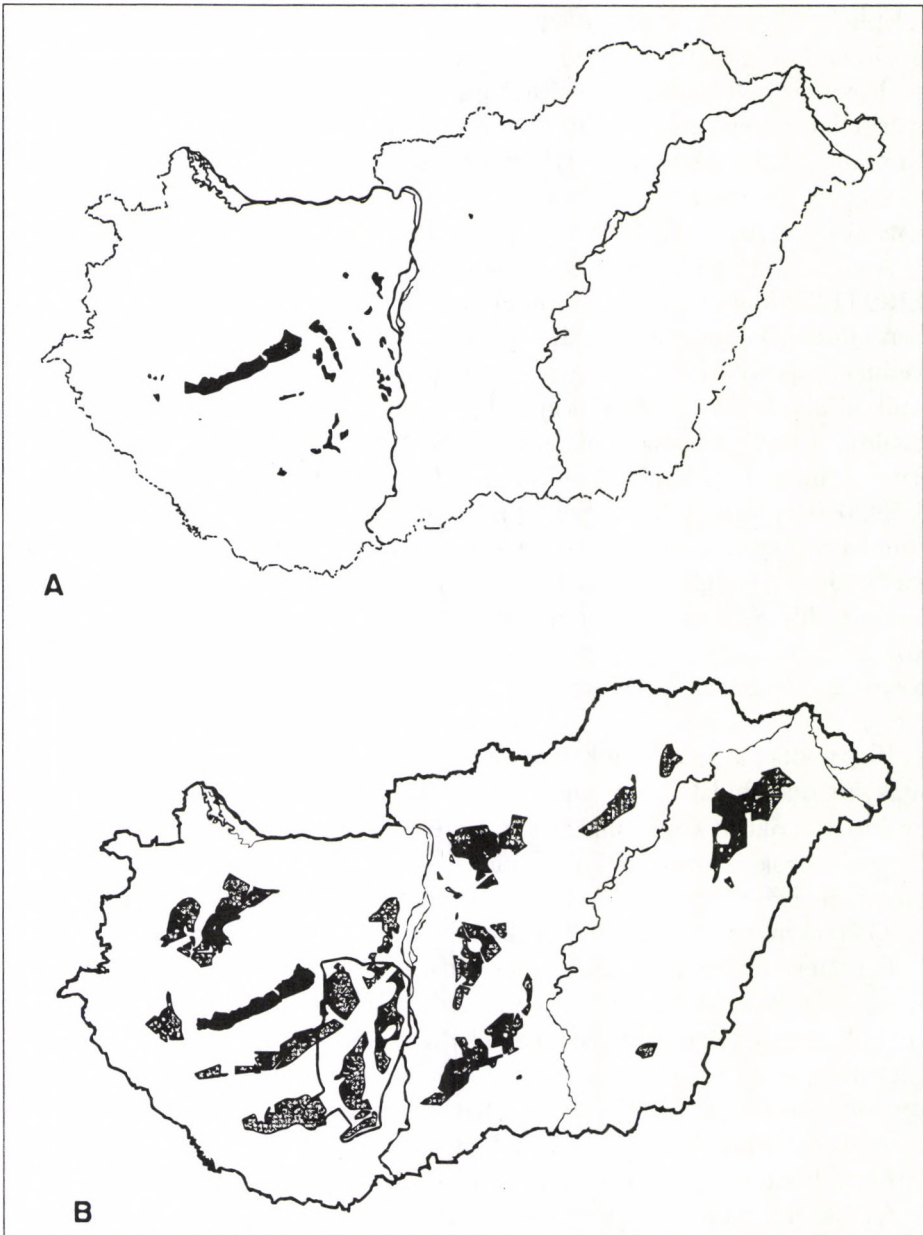
telephelyjellemzést kellett megvalósítani, majd a kormány és a parlament pozitív döntése esetén a tároló megépítésére kerülhet sor. Az atomenergiáról szóló törvény elfogadásáig a Paksi Atomerőmű Rt. volt a projekt megvalósításáért felelős szervezet. A földtudományi kutatások koordinálásával a Földtani Intézetet (továbbiakban MÁFI) bízták meg. A műszaki jellegű kutatások, a biztonsági elemzések és a létesítmény tervezésével kapcsolatos kérdések koordinálásával az ETV-ERŐTERV-et bízták meg.

A kutatások első lépéseként 1993-ban a Paksi Atomerőmű Rt. és az ETV-ERŐTERV *Komplex stratégia* címmel többkötetes tanulmányt készített, amelyben a hulladékkezelés és -csökkentés (pl. tömörítés) és a hulladéktárolók kutatásának alapelveit írták le. Ugyanebben az évben a szakértői bizottság közreműködésével *szakmai követelményrendszert* dolgoztak ki a tárolóhelyek kiválasztásához. Kisebb kiegészítésekkel ez a követelményrendszer máig érvényben van. Ennek figyelembevételével a MÁFI irányításával 1993–1994-ben 1:500 000 léptékű szakirodalmi felmérés készült az ország egész területéről. E munka első szakasza negatív szűrés volt. Ennek során politikai megfontolásból kimaradt az országhatár mentén egy 30 km széles sáv. Kimaradtak továbbá a lakott területek, a történelmi emlékhelyek, az üdülőkörzetek, a nemzeti parkok és a tájvédelmi körzetek, a működő és a távlati ivóvízbázisok, a tavak, folyók és víztárolók, valamint az árvízzel vagy belvízzel veszélyeztetett területek.

Kimaradtak az ipari és a katonai létesítmények, a bányák, a fontosabb vasutak, közutak, hidak és a repülőterek, továbbá a kőolaj- és földgázvezetékek. Szakmai okokból kimaradtak a felszíni és a felszín közeli karsztterületek, a gyógyforrások, a tőzeglápok és a földcsuszamlásos területek. E kizáró szűrés eredményeként az ország 93 000 km<sup>2</sup>-nyi területéből 6000 km<sup>2</sup> maradt felszíni és 23 000 km<sup>2</sup> felszín alatti hulladékelhelyezésre potenciálisan alkalmas.

Ezután következett a pozitív tényezők számbavétele és rangsorolása. Ennek alapján *objektumokat*, továbbkutatásra földtanilag alkalmasnak látszó térrészeket különböztettek meg. Felszíni elhelyezésre főleg széles és lapos dombtetőket választottak ki. A felszín alatti elhelyezésnél a kedvező hidrogeológiai helyzet volt a fő szempont. Az 1. ábrán láthatók az ország területén így kijelölt kedvező objektumok, külön a felszíniek és a felszín alattiak. A MÁFI 1994-ben erről a felmérésről jelentésben számolt be.

A szakértői bizottság véleményének meghallgatása után az illetékes hatóságok Pakstól nyugatra egy kb. 5000 km<sup>2</sup> kiterjedésű területet jelöltek ki részletesebb, 1:100 000 léptékű szakirodalmi felmérésre. E terület körvonala az 1/B ábrán látható. A döntés alapjául egyrészt az szolgált, hogy itt számos felszíni és felszín alatti potenciális objektum található, másrészt az, hogy ez a terület

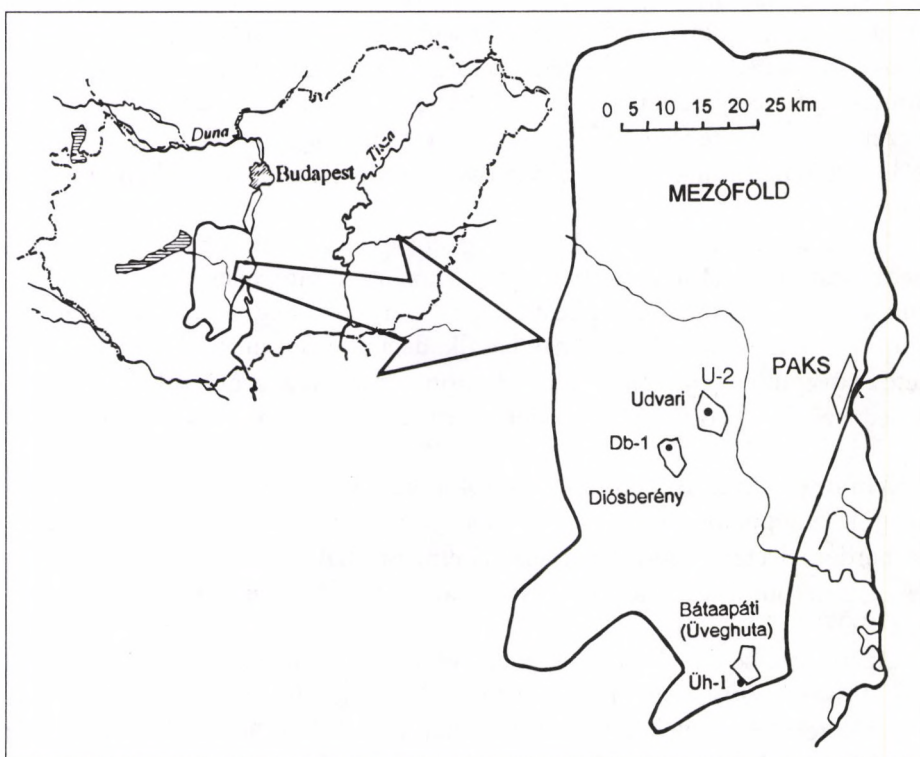


1. ábra. Az országos szakirodalmi felmérés eredményei (MÁFI, 1996): a) felszíni elhelyezésre perspektivikus objektumok; b) felszín alatti elhelyezésre perspektivikus objektumok



a paksi atomerőmű közelében helyezkedik el, tehát a hulladékot csak kis távolságra kell majd szállítani.

E területen a MÁFI 1994–95-ben pontosította az első ütem eredményeit, pl. minden település körül 1 km széles védősávot vettek fel. A területen végül is 128 továbbkutatásra alkalmas felszíni és 193 felszín alatti potenciális objektumot jelöltek ki, és ezeket rangsorolták. Ezekről a Paksi Atomerőmű Rt. kikérte az érintett lakosság véleményét. Sajnos a válaszok többnyire elutasítóak voltak, és így összesen 7 felszíni és 16 felszín alatti objektum maradt, amelyen a lakosság hozzájárulásával a kutatások folytatására volt lehetőség. Ezek közül az illetékes hatóság három felszíni objektumot választott ki Udvari, Diósberény és Németkér térségében. Németkér lakossága a hozzájárulást utólag visszavonta, így ez az objektum kiesett. A diósberényi és az udvari objektum felső pliocén és negyedkori üledékekből álló dombtetőkön helyezkedik el. Felszín alatti



2. ábra. Az 1:100 000 léptékű szakirodalmi felmérés területe a lakosság által elfogadott, a továbbkutatásra alkalmas objektumokkal és a fúrások helyével (MÁFI, 1996)

kutatásra a Mórággyi Gránitrög területén az üveghutai elhagyott falu térségét választották ki Bátaapáti község közigazgatási területén. Ezeknek az objektumoknak a helyét láthatjuk a 2. ábrán.

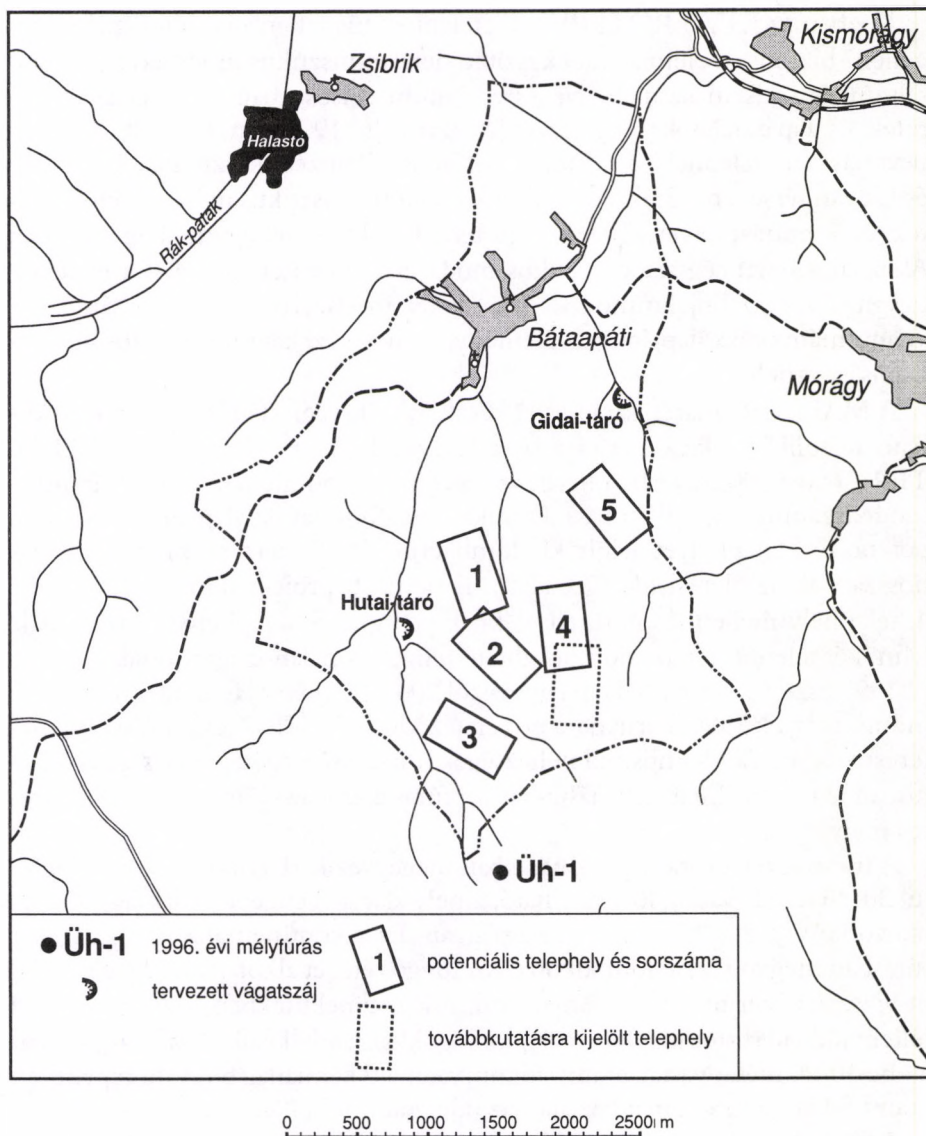
1995-ben e három objektumon folytatódtak a kutatások 1:50 000 léptékben. Földtani térképezés folyt, felmérték a vízzáró és s vízvezető képződmények helyzetét, a forrásokat és a felszíni vízfolyásokat. Geomorfológiai, gazdaságföldrajzi és ökológiai felmérések is készültek. Számos felszíni geofizikai mérést végeztek, és meghatározták a talajvíztükör helyzetét. A csapadék és a párolgás figyelembevételével számítógépes talajvíz-áramlási modelleket készítettek. Ezt követően a három objektum mindegyikén, a földtanilag legalkalmasabbnak látszó helyen egy-egy magfúrás mélyült. Az udvari fúrás 97 méter lösz és 53 méter tarka agyag alatt 150 méter mélységben érte el a felső pannon üledékeket, és azokban 170 méter mélységig haladt. A diósberényi fúrás 59 méter lösz és 4 méter tarka agyag alatt 63 méter mélységben érte el a felső pannon üledékeket, és azokban 150 méter mélységig haladt. Végül Bátaapátitól délre az Üh-1 jelű fúrás 40 méter negyedkori lösz és tarka agyag alatt érte el a gránitot. Ennek legfelső 18 métere laza és mállott volt, majd üde, kemény gránit következett. Az eredetileg 500 méteresre tervezett fúrás sajnos csak 364,5 métert ért el egy 295 métertől kezdődő erősen összetört zóna műszaki nehézségei miatt.

Mindhárom fúrásban részletes rétegtani, kőzettani, hidrogeológiai és lyukgeofizikai vizsgálatok készültek. Ezek alapján számítógépes talajvíz-áramlási modelleket készítettek és elérési időket határoztak meg. Mindhárom objektum továbbkutatásra alkalmasnak látszik, de a nemzeti projekt irányító testülete az üveghutai objektum mellett döntött a gránit kedvezőbb tulajdonságai és a kedvezőbb hidrogeológiai modell miatt. Udvari lett az első számú tartalék terület.

Mindezen kutatások eredményeiről a MÁFI számos szerző részvételével magyar és angol nyelven tanulmánykötetet jelentetett meg. Ebből külön említést érdemel a térség hidrogeológiai jellemzése (Balla, Tóth, Könczölné, 1997) és a gránitkomplexum korszerű ásványtani és kőzettani vizsgálata (Buda, Pus-kás 1997).

Az üveghutai objektum a korábbi ófalui kutatási területtől légvonalban mindössze 8 km távolságra van. Felvetődhet a kérdés: helyes-e egy elvetett kutatási terület közelében folytatni a kutatásokat? Először is Ófalunál felszíni tárolót akartak létesíteni, Üveghutánál pedig gránitban elhelyezendő, felszín alatti tárolóról van szó. A két objektumot az ún. „Mecsek-alja szerkezeti vonal” választja el egymástól, és e vonal két oldalán teljesen más a földtani és tektonikai felépítés. Ezért ezeket az aggályokat megalapozatlanoknak tartom.





3. ábra. A MÁFI által javasolt öt potenciális telephely elhelyezkedése. Pontozott vonallal jelölve a továbbkutatásra kijelölt terület rész (MÁFI, 1997)

Közben az ETV-ERŐTERV ún. „telephelyfüggetlen” és „létesítményfüggetlen” biztonsági elemzéseket készített determinisztikus módszerrel, külön a felszíni és a felszín alatti elhelyezésre. E munka elsősorban módszertani ismeretek és tapasztalatok megszerzésére irányult. 1996-ban több alvállalkozó bevonásával „telephelyspecifikus” biztonsági elemzést készítettek Üveghuta és Udvari térségére. Ezek a számítások is determinisztikus módszerrel készültek, és a lezárást követő 10 000 évre terjedtek ki. Ezzel egy időben a Golder Associates nevű cég sztochasztikus módszerrel készített biztonsági elemzést ugyanezekre az objektumokra. A mindkét módszerrel készült számítások áttanulmányozása alapján az a véleményem, hogy ezeket még jelentős bizonytalanság terheli.

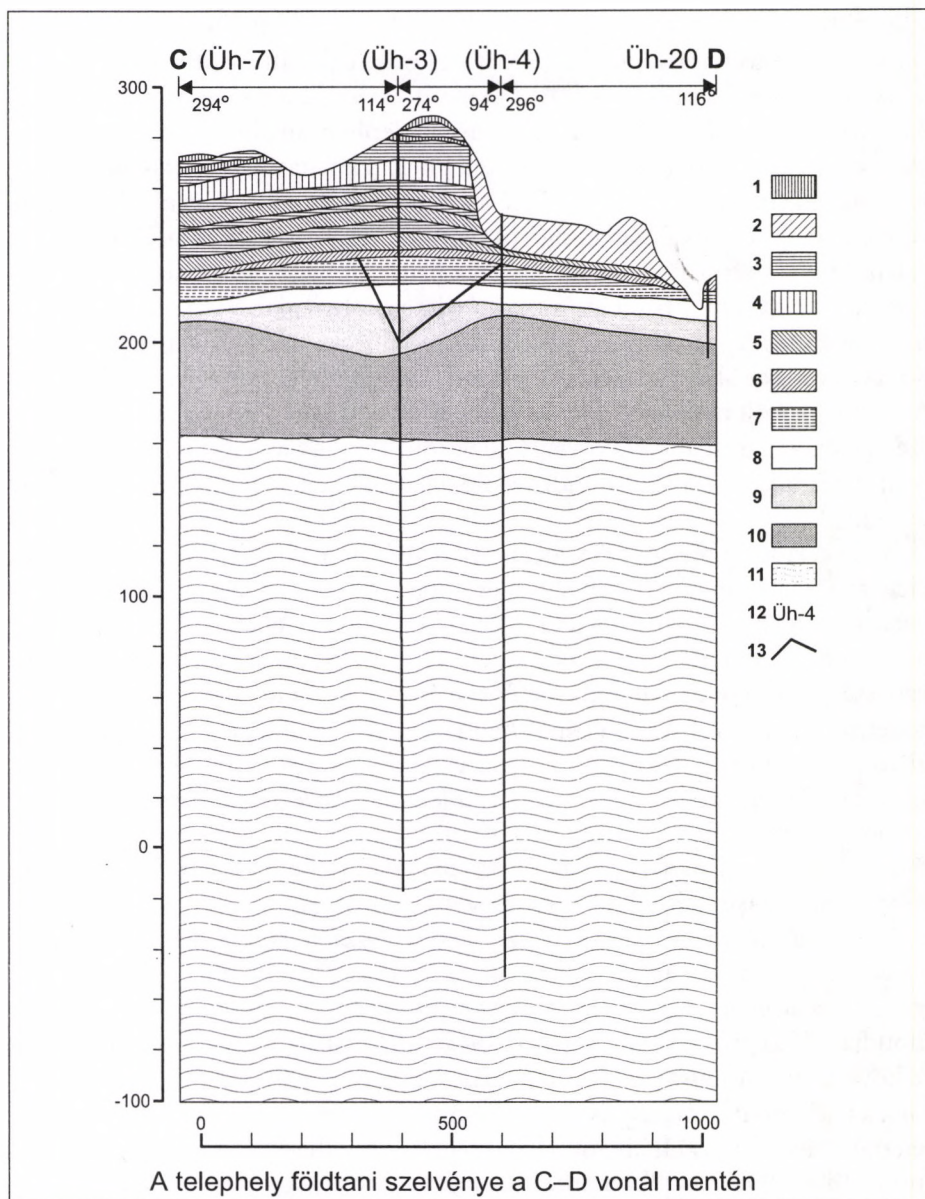
A MÁFI 1997 márciusára tervet készített az Üveghuta térségében kialakítható telephelyek kiválasztására. A telephelyek alapterületét az ETV-ERŐTERV 600 x 300 méterben határozta meg. Háromdimenziós talajvízáramlási modellszámítások, valamint tektonikai megfontolások alapján a MÁFI öt potenciális telephelyet jelölt ki dombgerinceken, mert szerinte itt a leghosszabbak az elérési idők (3. ábra). A nemzeti projekt irányító testülete a 4. telephely mellett döntött, tartaléknak pedig az 5. telephelyet választották. Mindkét telephelyet az adott dombtető tengelyvonalához igazították.

1997 őszén a 4. telephelyen egymástól 200–200 méter távolságra négy fúrás indult, melyek 1998 februárjára be is fejeződtek. Az Üh-2 jelű fúrást 500 méteresre tervezték, de műszaki nehézségek miatt 381,9 méter mélységben, gránitban le kellett állítani. A másik három fúrás elérte az előírt 300 méteres mélységet.

A fúrások rétegsora nagy vonalakban megegyezik az Üh-1 fúrásával: legfelül 30–40 méter vastag lösz található, amely alatt a Tengelici Tarkaagyag Formáció következik 2–7 méter vastagságban. Ez a kontinentális agyag minden fúrásban megvolt, és a dombokon összefüggő réteget alkot. Az eddig elvégzett öt vizsgálat szerint agyagásványokban, főleg szmektitekben gazdag, és ezért feltehetően jó izotópmegkötő tulajdonságokkal rendelkezik. A tarkaagyag alatt előbb 10–20 méter vastag granitoid murva, majd kémiai bontott, repedezett granitoid következik, majd ez alatt az üde granitoid (4. ábra).

A fúrásokban igen sokféle földtani, ásványtani, kőzettani, tektonikai, hidrogeológiai és geofizikai vizsgálatot végeztek, melyek közül kiemelést érdemel a lyukfaltelevízió és a saját fejlesztésű számítógépes magszkenner alkalmazása. Ismételt packeres méréseket végeztek a talajvízáramlás meghatározására. A fúrások között felszíni geofizikai szelvényeket fektettek. A fúrások közötti tér mélységi átvilágítására szeizmikus sebesség- és abszorpciós tomográfiai méréseket végeztek. Az áramlási kép tisztázására a dombtetőkön további három, a





4. ábra. Földtani szelvény a 4. számú telephelyen át (MÁFI, 1998). Jelmagyarázat: 1 – erdőtalaj, 2 – csuszamlásos üledék, 3 – lösz, 4 – fosszilis erdőtalaj, 5 – fosszilis erdőtalaj, 6 – tarkaagyag, 7 – gránitmurva, 8 – széteső gránit, 9 – erősen mállott gránit, 10 – gyengén mállott gránit, 11 – felszíni hatásoktól mentes gránit, 12 – kutatófúrás, 13 – vető

völgyekben pedig öt magfúrást végeztek 20, ill. 80 méter mélységig. Az áramlási modell pontosítására végül abszolút vízkor-meghatározások történtek.

1998. szeptember 30-án a MÁFI benyújtotta az eddigi kutatás eredményeit összefoglaló *zárójelentését*. A jelentés célja a telephely alkalmasságának elbírálása. Személyes véleményem szerint a telephely a kutatások folytatására és befejezésére alkalmas, mert az értékelés során nem adódott olyan körülmény, amely a telephely alkalmatlanságáról tanúskodna. Bizonytalan még a tektonikai modell, mert a fúrások távolsága a hatástávolságot meghaladja, továbbá mert a mórággyi gránitban nem sikerült eddig geofizikai módszerekkel a tektonikai felépítést egyértelműen tisztázni. Csupán annyit sikerült megállapítani, hogy a gránitot átszelő törésvonalak a fiatal fedőrétegekre nem terjednek át. Azt sem sikerült tisztázni – a rossz magkihozatal miatt –, hogy a több tíz méter széles zúzott zónákat csak közetzúzalék tölti ki, vagy azt agyag is cementálja. Mindezek miatt a kialakított hidrogeológiai modellt is még sok bizonytalanság terheli.

A szakértői bizottság 1998. decemberi ülésén a zárójelentést a szükséges kiegészítések és módosítások elvégzése után elfogadásra ajánlotta. Amennyiben a felsőbb hatóságok ezt a javaslatot elfogadják, úgy elkészülhet a földtudományi kutatás befejező szakasza. Ennek célja a befogadó kőzet izotópmegkötő képességének, a telephely hidrogeológiai és tektonikai felépítésének, valamint kőzetmechanikai tulajdonságainak kellő részletességű megismerése, továbbá a biztonsági elemzés előkészítése. Az a véleményem, hogy *a telephely részletes, hálózatos felfúrása súlyosan veszélyeztetné a leendő hulladéktároló biztonságát*. Ezért egy jóval pontosabb és részletesebb ismeretszerzést biztosító *kutatóvágot* kihajtását javaslom, oly módon, hogy az összhangban legyen a kialakítandó bányászati létesítmények térbeli elhelyezésével.

A földtudományi kutatás befejező lépése lesz a *biztonsági elemzés*. Amennyiben ez pozitív eredménnyel zárul, úgy megkezdődhet a hosszadalmasnak ígérkező hatósági engedélyezési eljárás, melyben a végső szót a parlament mondja ki. Ezután a telephely ipari-bányászati kutatása, tervezése és megépítése következik. Amennyiben a biztonsági elemzés negatív eredménnyel zárul, vagy a parlamenti jóváhagyás nem történik meg, úgy a gránitmasszívum területén új telephelyet kell kijelölni, vagy a gránitot felhagyva, az udvari objektumon kell a kutatásokat folytatni.

Végül szólnom kell még arról, hogy a gránitmasszívum tektonikai stabilitásának helyes megítélése szempontjából igen fontos az ún. „Mecsek-alja tektonikai vonal” lefutásának és korának minél pontosabb megismerése. Ezért a Paksi Atomerőmű Rt. megbízásából 1997-ben a GEOMEGA Kft. Horváth Ferenc geofizikus szakmai irányításával egy- és többcsatornás, nagy felbontású

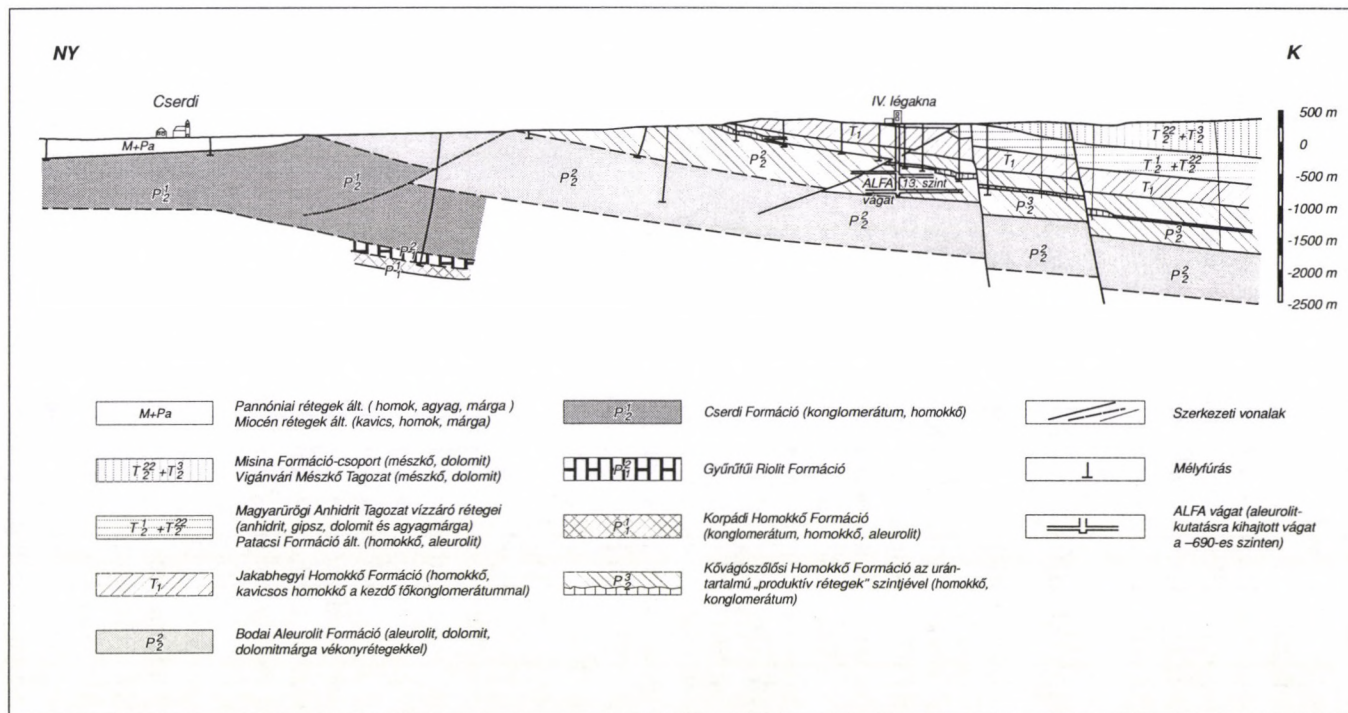


szeizmikus méréseket végzett a Dunán, továbbá jelentésben értékelte a Keleti-Mecsek, valamint a Szekszárdi-dombvidék neogén tektonikai fejlődés-menetét. Jelentésük szerint nincsenek e területen a felszínig hatoló, jelenleg is aktív törésvonalak, bár a pleisztocénban még voltak tektonikai mozgások. *In situ* feszültségméréseik szerint e területen ma is É–D és ÉÉK–DDNY irányú kompressziós jellegű feszültségek mutathatók ki. Ezt a körülményt a tároló létesítéskor figyelembe kell venni.

## A hazai nagy aktivitású hulladékok tárolóhelyének kutatása

A nagy aktivitású hulladékok kutatása a fentiekől eltérően alakult. Meghatározó volt, hogy a Mecsek hegységben az 1950-es évek óta uránércbányászat folyt a felső perm korú Kővágószőlősi Homokkő Formációból. A bányászatot kiegészítő földtani kutatás az egész perm időszi rétegösszlet jobb megismeréséhez vezetett. A Kővágószőlősi Homokkő Formáció fekvését képező Bodai Aleurolit Formációt (továbbiakban BAF) is több fúrással feltárták, és felismerték, hogy ez a képződmény mind a toxikus, mind a radioaktív hulladékok tárolására alkalmas. Ezért a Mecseki Ércbányászati Vállalat (továbbiakban MÉV) 1989-ben javaslatot készített a BAF feltárására az uránércbánya 1050 m mélyen levő szintjéből vízszintesen kihajtott kutatóvágat segítségével. A MÉV ezután saját költségén egy 750 méter hosszú vágatot hajtott ki a BAF irányába. 1991-ben pénzügyi nehézségek miatt a vágathajtást meg kellett szakítani, de a nemzeti projekt támogatásával 1993-ban folytatódott a vágat kihajtása. 1994-ben egy meredek törésvonal harántolása után elérték a formációt. A vágatot tovább hajtották, és belőle több irányba fúrásokat is végeztek. A vágatfalból és a fúrómagokból rendszeresen mintákat vettek, továbbá *in situ* és laboratóriumi vizsgálatokat végeztek. Ezek eredményeiről 1995-ben a MÉV jelentést készített.

A kutatások megnövekedett volumene és egyre sokrétűbb tartalma miatt az OAH 1995-ben kezdeményezte önálló kutatási program létrehozását a nagy aktivitású hulladékok elhelyezésére. Ennek kapcsán még ebben az évben hároméves *rövid távú kutatási programot* készített a MÉV az 1995–1998 közötti időszakra (Kovács L., 1997). A program irányítására 1996-ban programirányító testület (továbbiakban PIT) alakult, amelyben több minisztérium, országos hatóság és a Tudományos Akadémia megbízottjai vesznek részt. 1998. július 1-je óta ezeket a kutatásokat is az RHKKT irányítja. A PIT-program dokumentuma szerint a kutatásokat két ütemben kívánják megvalósítani. Az első ütem a *rövid távú kutatási program* zárójelentésével fejeződik be, amit 1998. november 30-ig kellett benyújtani. Ebben a BAF tovább kutatásra való alkalmasságát kel-



5. ábra. A Bodai Aleurolit Formáció kelet–nyugat irányú földtani szelvénye (Mecsekérc Környezetvédelmi Rt., 1997)



lett bizonyítani, továbbá egy az egész országra kiterjedő szakirodalmi felmérést kellett készíteni. A második ütemben ki kell jelölni a tárolóhelyet és azt a szükséges mértékben meg kell kutatni. Közben a mélyszerint fenn kell tartani a kutatólaboratóriumot (URL). A tárolóhelyen bányászati eszközökkel egy újabb mélyszerinti laboratóriumot kell létesíteni, és ebből folytatódnak majd a tároló végleges bányászati létesítményei. A tároló megépítése véleményem szerint 2–4 évet vehet igénybe és 2035–2040-re készülhet el.

A rövid távú kutatási program négy időszakos részjelentése, valamint zárójelentése alapján a BAF-ról szerzett eddigi ismereteinket az alábbiakban lehet összefoglalni:

A BAF felső perm korú, tehát mintegy 245–255 millió éves képződmény. Fúrásokkal igazolt térbeli kiterjedése kb. 150 km<sup>2</sup>, ebből Boda község közelében 14 km<sup>2</sup> területen a felszínen van. Felszíni fúrásokkal igazolt vastagsága 700–900 méter. A formáció egy kelet felé dőlő antiklinális északi szárnyán helyezkedik el, ezért van Boda térségében a felszínen és az uránércbánya térségében 1000–1200 méter mélyen a felszín alatt. Ezt a helyzetét szemlélteti a Mecsekérc Rt. által készített földtani szelvény (5. ábra).

Sokoldalú szedimentológiai vizsgálatok szerint a BAF félsivatagi-sivatagi klímán felhalmozódott sekélytavi üledék (Hámos, Máthé, Majoros, 1996). A leülepedést szokatlanul erős diagenetikus ásványképződés, nevezetesen albitizálás követte. A BAF fektíje durva szemű homokkő és konglomerátumból álló folyóvízi üledék, a Cserdi Formáció. A BAF fedője szintén folyóvízi homokkő és konglomerátum, amely felső részén uránérclepeket tartalmaz. Ez a Kővágószőlősi Formáció (Hámos et al., 1966.). Maga a BAF öt kőzetfajta váltakozásából áll. Ezek: albitos agyagkő > albitos aleuritós agyagkő > albitos aleurolit > albitos dolomit > albitolit. Ezek a kőzetfajták egymással váltakozó 2–20 cm vastag rétegeket alkotnak.

A nagyszámú ásványtani vizsgálat (vékonycsiszolat, diffraktometria, DTA és termogravimetria, pásztázó elektronmikroszkópia, elektron-mikroszkópia) szerint a BAF egésze az alábbi ásványtani összetétellel jellemezhető:

plagioklász (főként albit)	25–65%
kvarc	5–35%
kalcit, dolomit	10–60%
hematit	2–12%
agyagásványok	5–50%

Az agyagásványok között leggyakoribb az illit-szericit, ezt követi a klorit, majd az illit-klorit és illit-szmektit kevert rácsszerkezetek, végül a kaolinit. A BAF felszíni és felszín közeli részein a mállás eredményeként montmorillonitot is kimutattak a vizsgálatok. Az MTA Geokémiai Kutatólaboratóriumában



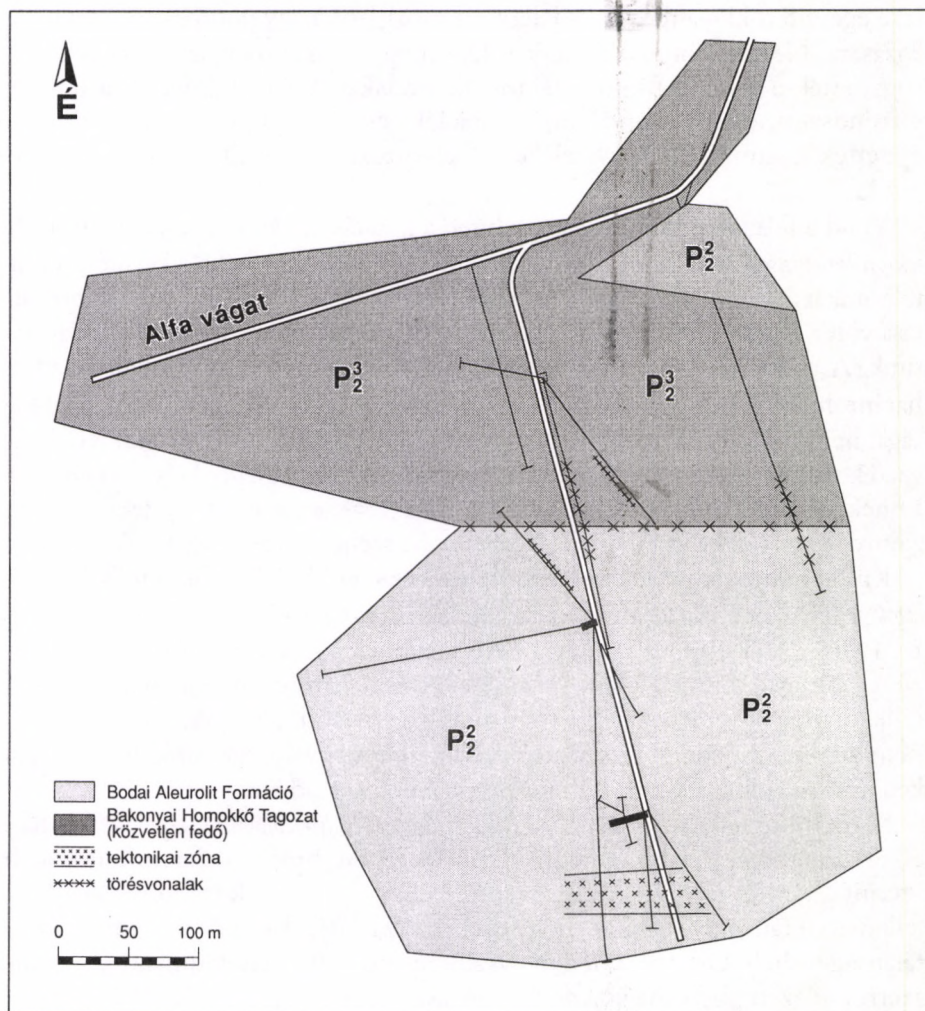
elvégzett ásványtani vizsgálatok szerint az illit és a klorit kristályossági indexei a diagenézis és a kis hőmérsékletű anchimetamorfózis határzónájába esnek.

A képződmény túlnyomóan vörösbarna színű, kemény kőzet, melynek rétegzettsége szabad szemmel is jól felismerhető. A legkülönbözőbb irányokban 1–30 mm vastag repedések és hasadékok járók át, melyeket sárgásfehér, kemény anyag tölt ki. Az ásványtani vizsgálatok szerint a repedéseket a következő ásványok töltik ki: kalcit, anhidrit, gipsz, kvarc, dolomit, albit, barit, cölesztin és igen kis mennyiségben kaolinit, pirit, kalkopirit és galenit. Az ásványok kifejlődése és összetétele alacsony hőmérsékletű, felszálló hidrotermákat valószínűsít. Ezt erősítették meg a repedéskitöltéseken végzett K-Ar abszolút kormeghatározások, melyek szerint a repedéskitöltések kora  $80 \pm 3$  millió év, ami felső krétának felel meg. Tehát a repedéskitöltések a képződmény alapanyagánál jóval fiatalabbak! A kőzetet alkotó ásványokat egyébként genetikai szempontból is vizsgálták, és megállapították, hogy az ásványoknak csak 30–50%-a törmelékes eredetű, 40–60%-a diagenetikus. Egyes helyeken a diagenetikus albit mennyisége még ennél is több, és ilyenkor indokolt a kőzetet albitolitnak nevezni. Ennek a diagenetikus ásványkitöltésnek köszönhető a BAF oly kedvező tulajdonságai a hulladéktárolás szempontjából.

A BAF tehát egy egész sor igen kedvező tulajdonsággal rendelkezik, amelyek közül ki kell emelni a képződmény rossz vízvezető képességét ( $k = 10^{-8} - 10^{-12}$  m/s) és kis transzmisszivitását ( $T = 10^{-11} - 10^{-8}$  m<sup>2</sup>/s) (Csicsák, 1996). Igen kedvező továbbá a képződmény erőteljes izotópmegkötő képessége, amit első sorban agyagásványainak, továbbá rendkívül finom szemcsés hematittartalmának köszönhet. A BAF természetes radioaktivitása is kicsiny: 200 Bq/kg, átlagos fémurántartalma pedig csak 2–11 ppm. Özehasonlításképpen szolgálhat, hogy a Kővágószőlősi Formáció uránérctelepei átlagosan 1117 ppm fémuránt tartalmaznak – a földtani vagyona vonatkoztatva. A BAF átlagos thórium-tartalma 3–20 ppm, káliumtartalma pedig illit-szericit-tartalmától függően 0,8–5%.

Részletesen vizsgálták továbbá a BAF geotermikus tulajdonságait. A felszíntől a kutatóvágatig terjedő mélységszakaszban a geotermikus gradiens 22 m/°C. Ennek megfelelően a kutatóvágatot körülvevő kőzet hőmérséklete kerekén 50 °C. Nyilvánvaló, hogy a nagy aktivitású hulladékok rendkívül nagy hőteljesítménye miatt nem szabad ilyen közethőmérsékleten végleges tárolót elhelyezni. Szerencsére a BAF kibúvási területén a nemzetközileg javasolt 400–800 méter mélységben a fenténél lényegesen kisebb közethőmérsékletre lehet számítani. Ezeknek a megfontolásoknak a figyelembevételével a rövid távú kutatási program keretében a BAF kibúvási területein felszíni kutatások kezdődtek. A topográfiai térkép pontosítására légi felvétel készült, majd 26 km<sup>2</sup>





6. ábra. A Bodai Aleurolit Formációt feltárt kutatóvágat és mélyszerinti fúrások helyszínrajza (Mecsekérc Környezetvédelmi Rt., 1997)

területen 1:4000 méretarányban új földtani térképet készítettek. Ennek során minden egyes természetes és mesterséges feltárást leírtak, lefényképeztek, megmintáztak és részletesen dokumentáltak. Hat magfúrás készült a BAF mállási zónájának megismerésére. (Ne feledjük, hogy a mállási zóna agyag-ásványai kiegészítő földtani gátat képezhetnek!) A neotektonikai mozgások felismerése céljából geomorfológiai felvétel készült, amit GPS-pontok telepí-

tése egészített ki – a tényleges jelenkori mozgások nagy pontosságú meghatározására. Néhány fontosabb helyen felszíni geofizikai méréseket végeztek, és rögzítették a felszínre kifutó tektonikai zónákat. Végül felmérték a felszíni vízrendszert, és egy állandósított csapadék- és vízmegfigyelő mérőrendszert építettek ki, amit a felszíni vizek kémiai elemzése, pH- és Eh-vizsgálata egészített ki.

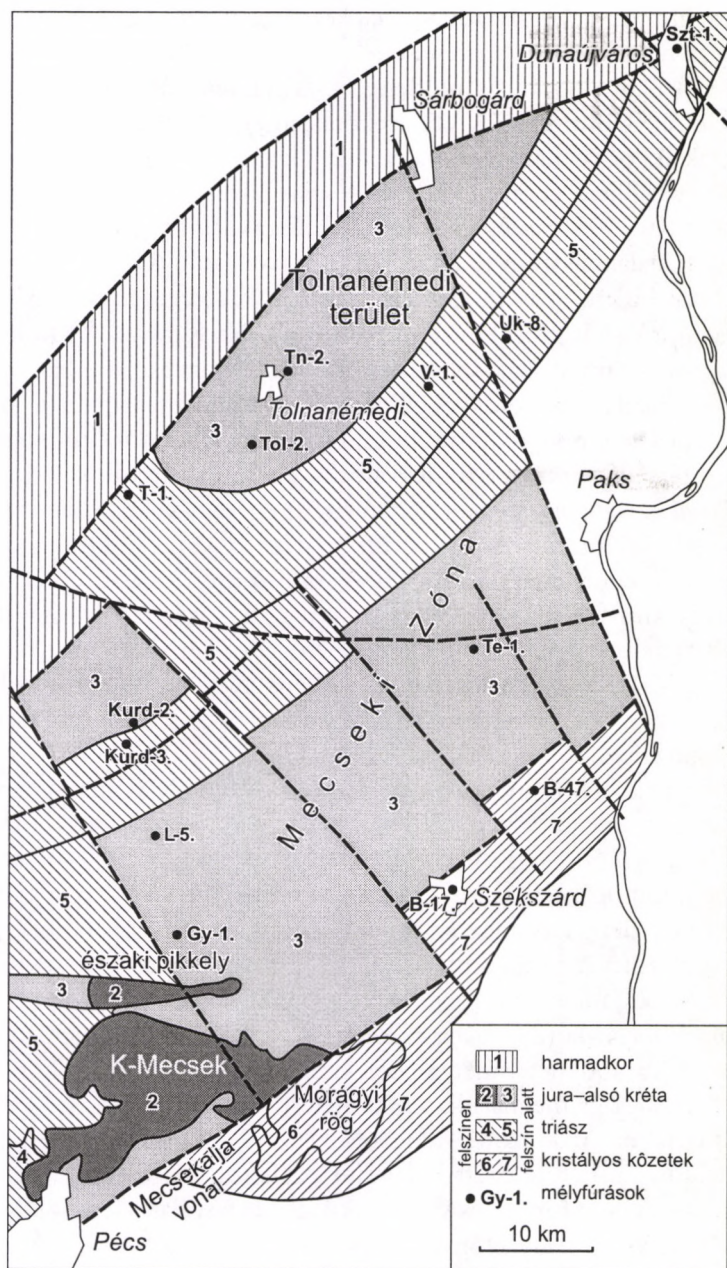
Mind a felszínen, mind a mélyszinten a kutatások kiemelt részét képezték a *tektonikai vizsgálatok*. A több évtizedes uránércbányászat során sikerült a térség tektonikai felépítését tisztázni, most a helyi tektonikai vonalak és zónák pontosítása volt a feladat. Ezek közül néhányat a földtani szelvényen (5. ábra) is láthatunk. A mélyszinten sikerült egy nagyobb tektonikai zónát vágattal elérni és harántolni (6. ábra). Ennek során kiderült, hogy e zóna hidrogeológiai tulajdonságai nem rosszabbak a környező, nem diszlokált kőzeténél. Ez rendkívül kedvező körülmény, és remény van arra, hogy ez a tároló végleges helyén is így lesz. Ennek ellenére törekedni kell arra, hogy a végleges tárolóhely tektonikailag zavartalan térrészbe kerüljön, de legalábbis ne szeljék át vastag tektonikus zónák.

Külön pontot képeztek az igen részletes és sokoldalú *kőzetmechanikai vizsgálatok*, melyeket a vágatban és az onnan készített fúrásokban végeztek (Kovács L., 1996, 1997). Kiderült, hogy a BAF kőzetmechanikai tulajdonságai kedvezőek, jók a fő szilárdságtani paraméterek és a bányaműszaki tulajdonságok (állékonyság, jöveszthetőség, a robbantás hatásai stb.), továbbá az, hogy a kőzet nem duzzad. Az eddigi vizsgálatok eredményei azt valószínűsítik, hogy ezek a kedvező tulajdonságok hosszú időn át stabilok maradnak.

Már említettem, hogy a mélyszinten végzett *hidrogeológiai vizsgálatok* kedvező eredménnyel jártak. Az eddig elkészült háromdimenziós áramlási modell szerint a tároló helye beszívárgási területen van, tehát a leszálló vízmozgás a jellemző. Hangsúlyozni kell, hogy ezeket a számításokat még számos bizonytalanság terheli. Ugyanakkor a mélyszinten vett vízminták radiokarbon-módszerrel végzett abszolút kormeghatározása megerősíti a rendkívül lassú vízmozgást és az igen hosszú elérési időket (20 000–25 000 év). Megerősítik ezt az eredményt a képződményből vett vízminták H- és O-izotóp-vizsgálatai, melyek szerint e vízminták pleisztocénkorúak (Demény, Fórizs és Máthé 1996).

Az eddig elvégzett kutatások százazres nagyságrendű adatot szolgáltatottak. Ezek tárolása, csoportosítása és feldolgozása hagyományos kézi úton igen lassú és körülményes lenne. Ezért tartom különösen fontosnak, hogy a Mecsekérc Rt. a DASY Döntés- és Rendszerelemző Kft. segítségével számítógépes adatbázist és térinformatikai rendszert épített ki, melynek feltöltése a kutatásokkal párhuzamosan folyik.





7. ábra. A Tolnanémedi térségében feltárt jurakorú foltosmárga összlet vázlatos helyszínrajza (MTA Földrajztudományi Kutató Intézet, 1997)



A mélyszerinti munkák folytathatóságát kérdésessé tette az a kormányhatározat, amely az uránércbánya termelésének 1997. december 31-ével történő befejezését és a bánya bezárását rendelte el. A rendelet értelmében folynak a bánya bezárásának munkálatai. A fentiekben ismertetett mélyszerinti kutatólétesítmény csak akkor tartható fent, ha biztosítják a bányától független működési feltételeit (pl. szállítás; energiaellátás, hűtés, szellőzés, vízkiemelés stb.). Ezért a Mecsekérc Rt. 1998-ban egy a bányától műszakilag függetlenített mélységi laboratórium kialakítására és fenntartására tett javaslatot. A javaslat megítélésére a szakértői bizottság homogenitás-számításokat végeztetett a Mecsekérc Rt.-vel, valamint a Miskolci Egyetem Bányamérnöki Karával. Az utóbbiak ún. költség/haszon számításokat is végeztek a további kutatási munkák optimális változatának kiválasztása érdekében. Ezek eredményei alapján a szakértői bizottság arra a véleményre jutott, hogy a mélységi laboratóriumot a jelenlegi kutatóvárat térségében célszerű megvalósítani és működtetni.

A rövid távú kutatási program keretében egy az egész ország területére kiterjedő szakirodalmi felmérésre is sor került, melyet az MTA Földrajztudományi Kutató Intézete koordinált, és amelyben számos külső szakértő vett részt. E felmérés célja annak tisztázása volt, hogy van-e az ország területén a BAF-nál kedvezőbb tulajdonságokkal rendelkező „befogadó” képződmény. Alapos előzetes mérlegelés és konzultációk alapján 12 képződményt választottak ki erre a feldolgozásra. Az 1997 novemberére elkészült jelentés szerint összesen alkalmasnak látszó képződményt találtak. Ezek a következők:

A) Az alsó és középső jurakorú *foltosmárga összlet*, amely Tolnanémedi térségben kb 50 km<sup>2</sup> kiterjedésben található, pannon korú fedő alatt mintegy 200 méter mélységben (7. ábra). Az összlet vastagsága eléri az 1000 métert, makroszkóposan homogénnek látszik, és kis vízvezető képességű. A képződmény anyagán eddig érdemi anyagvizsgálat nem készült, és a térség tektonikai felépítése sem tisztázott. A továbbkutatáshoz felszíni geofizikai mérésekre és legalább egy 500–600 méter mélységet elérő magfúrásra lesz szükség.

B) Az alsómiocén-korú *Gyulakeszi Riolitufa Formáció*, amely Nagydorog község közelében kb. 400 méter mélységben kiterjedt vulkáni kürtőt alkot (7. ábra). A formáció vastagsága meghaladja a 600 métert. Előnye a jó vízzáró képessége, nagy zeolitartalma (radioizotóp-megkötő képessége szükségszerűen nagy) és nyugodt tektonikai helyzete. Itt is felszíni geofizikai mérésekre, legalább egy 500–700 méteres mélyfúrásra és széles körű anyagvizsgálatra lesz szükség.

Mindkét helyszín nagy előnye, hogy a paksi atomerőműhöz viszonylag közel van, tehát a szállítási útvonal rövid lenne. A jelentés szerint további hat formáció részben alkalmasnak látszik nagy aktivitású hulladék mélységi elhelyezésére. Ezek közé tartozik az alsó oligocénkorú *Kiscelli Agyag Formáció*. Nagy



térbeli kiterjedése és vastagsága kedvező, viszont hátrányos a korróziókeltő nagy pirittartalma és a paksi atomerőműtől való *nagyobb távolsága*. Ebbe a csoportba tartozik még a Mórágyi Gránitkomplexum felszín alatti folytatása a Sárrét felé, a Gyódi Szerpentinít Formáció, a Görcsönyi Kristályospala Összet, a Gyűrűfői Riolit Formáció és a Tari Dácittufa Formáció. A fennmaradó négy formációról kiderült, hogy nem alkalmasak nagy aktivitású hulladék tárolására.

Ez az igen alapos értékelés megerősítette azt a kiinduló véleményemet, hogy jelenlegi ismereteink szerint hazánk területén a BAF a legalkalmasabb nagy aktivitású hulladék mélységi elhelyezésére. Ennek ellenére szükségesnek tartom a két alkalmasnak látszó képződmény területén a kutatások folytatását, mert a nemzetközi tapasztalatok szerint nagy aktivitású hulladékok telephelykutatásánál mindig szükség van előzetesen megvizsgált alternatív telephelyekre. Ismereteim szerint ezért 1999-ben e két helyszínen a kutatások folytatódni fognak.

## Külföldi tapasztalatok figyelembevétele

A radioaktív hulladékok elhelyezése céljából végzett kutatások költségessége és a rendkívül nagy biztonsági igények miatt törekednünk kell minden külföldi tapasztalat megismerésére és közülük azok hasznosítására, amelyek hazai földtani viszonyainkba beleilleszthetők. Idetartozik a külföldi szakirodalom rendszeres figyelése és feldolgozása, melyhez a MÁFI könyvtárának számítógépes szakirodalom-lekérdező rendszere nagy segítséget nyújt. Az Európai Unió és az OECD szakembereinek látogatásai, előadásai és helyszínbemutatói is számos hasznos tapasztalattal jártak. Emellett számos geológus bevonásával külföldi tanulmányutakat szerveztek, és lehetővé tették hazai szakemberek részvételét nemzetközi konferenciákon.

A nagy aktivitású hulladékok tárolóhelyének kutatását hasznosan segítette a Paksi Atomerőmű Rt. és az Atomic Energy of Canada Ltd. (AECL) között 1993-ban létrejött együttműködési szerződés. Ennek keretében magyar geológusok tekinthették meg a cég kanadai (Pinawa) mélységi kutatólaboratóriumát, és kanadai szakemberek több látogatás keretében ismertették tapasztalataikat. A kis és közepes aktivitású hulladékok kutatásába közvetlenül bekapcsolódott az amerikai Golder Associates cég az üveghutai fúrások helyszíni szakmai felügyeletének biztosításával. Ugyancsak a Golder Associates készített 1996 végére egy előzetes biztonsági elemzést. Az Európai Unió PHARE programja keretében neves szakemberek látogatták meg a kutatások helyszíneit. 1998–99-ben a PHARE program anyagilag is támogatja az üveghutai

kutatásokat, két fúrásban speciális hidrogeológiai vizsgálatokat végeznek, és részt vesznek egy újabb biztonsági elemzés elkészítésében.

A hazai kutatások külföldi ismertetése nem kevésbé fontos. Ennek keretében a MÁFI 1997-ben magyar és angol nyelvű kiadványban számolt be a kis és közepes aktivitású hulladékok telephelykutatásának eddigi eredményeiről (MÁFI évi jelentése, 1996/II.). E jelentést számos külföldi intézménynek és nemzetközi szervezetnek megküldték, és arra sok pozitív visszajelzés érkezett.

## Következtetések

1. Az a véleményem, hogy az eddigi kutatások helyes irányban haladtak, és nemzetközi összehasonlításban is magas szakmai színvonalat képviselnek.

2. Az eddigi kutatási eredmények alapján – véleményem szerint – mind a kis és közepes, mind a nagy aktivitású hulladékelhelyezésre irányuló kutatásokat folytatni kell, mert objektív lehetőség van sikeres befejezésükre.

3. A szakmai színvonal mellett kiemelt fontosságúnak tartom a helyi lakosság és az ország közvéleményének folyamatos és teljes körű tájékoztatását a kutatások állásáról.

4. A Magyar Tudományos Akadémia fontos szerepet tölt be e kutatások szakmai ellenőrzésében és támogatásában. Ennek szellemében a Tudományos Akadémia elnöke háromtagú bizottságot jelölt ki – Marx György akadémikus elnöklétével – a kutatási eredmények felügyeletére. Az Akadémia ezenfelül évente vitaüléseket és ankétokat szervez az érintett szakemberek számára, továbbá állásfoglalásokat jelentet meg a kutatásokkal kapcsolatosan.

5. A kutatások – véleményem szerint – a gyakorlati feladat teljesítése mellett tudományos szempontból is fontosak, mert hazánkban ennek keretében volt először lehetőség a földtudományok valamennyi tudományágának, továbbá az izotópkémiának, a matematikának és a számítástechnikának együttes alkalmazására.



## Irodalom

- Balla Z. (1997): Kis és közepes radioaktívítású hulladékok elhelyezését célzó földtani kutatás, 1993–1996. (Site exploration for low and intermediate level radioactive waste disposal 1993–1996). *MÁFI Évi Jelentése*, 1996/II. 27–45.
- Balla Z., Tóth Gy., Könczöl N.-né (1997): Az üveghutai kutatási terület hidrogeológiai viszonyai (Hydrogeological conditions of the Üveghuta site and its area). *MÁFI Évi Jelentése*, 1996/II. 135–141.
- Bárdossy Gy. (1995): Radioaktív hulladék elhelyezésének kérdései Magyarországon. *Magyar Tudomány*, 8. 935–942.
- Bárdossy Gy. (1998): A radioaktív hulladékok elhelyezése Magyarországon. *Földtani Közlöny*, 128/1. 179–196.
- Buda Gy., Puskás Z. (1997): Az Üveghuta-1 fúrás kristályos kőzetei. (Crystalline rocks of Üveghuta-1 borehole). *MÁFI Évi Jelentése*, 1996/II. 77–98.
- Cramer, J. J., Smellie, J. A. T. (1994): *Final Report of the AECL/SKB Cigar Lake Analog Study*. Whiteshell Laboratories. Pinawa, Manitoba, Canada 393 p.
- Csicsák, J. (1996): Hydrogeological investigations on a claystone formation in the URL of Hungary. In: *TOPSEAL '96 Conference Stockholm. June 9–12. 1996*. Vol. II. 201–204.
- Demény, A., Fórizs, I., Máthé, Z. (1996): A preliminary stable isotope study on a potential radioactive waste repository site in the Mecsek Mountains, Southern Hungary. *Rapid Comm. in Mass Spectrometry*, Vol. 10. 1415–1417.
- Hámos, G. (1992): A javasolt nyugat-mecseki mélységi hulladéktároló földtani vonatkozásai. *Bányászati és Kohászati Lapok. Bányászat*, 35–38.
- Hámos, G., Máthé, Z., Majoros, Gy. (1996): The geology of Boda site, Hungary. Surface and URL based investigations. In: *TOPSEAL '96 Conference Stockholm. June 9–12. 1996*. Vol. II. 196–200.
- Kovács, L. (1996): Rock engineering investigations inside a claystone URL in Hungary. In: *TOPSEAL '96 Conference Stockholm. June 9–12. 1996*. Vol. II. 205–208.
- Kovács, L. (1997): A Bodai Aleurolit Formáció kőzetmechanikai és geotechnikai vizsgálati programja. *Bányászati és Kohászati Lapok. Bányászat*, 130, 4, 299–306.
- Performance Assessment of Geological Isolation Systems for Radioactive Waste (PAGIS)*. (1998) Published by the Commission of the European Communities, Luxemburg, 268 p
- Szabó I. (1992): A környezetvédelem helye az energiapolitikában. *Biotechnológia és Környezetvédelem*, 6. 2.
- Vajda, Gy. (1991): Mi lesz az atomerőmű hulladékaival? *Magyar Tudomány*, 9. 1094–1103.
- Vajda, Gy. (1998): Energiaforrások. *Magyar Tudomány*, 6. 645–675.





**XI. FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYA**





Zimányi József

az MTA rendes tagja

# A MAGANYAGTÓL A KVARKANYAGIG A NEHÉZION-FIZIKÁBAN

Személyes reflexiók egy húsz éve tartó  
nyomozás, keresés kapcsán

Elhangzott 1996. március 28-án

**A**nehézionfizika fejlődését az egymás után üzembe állított atommaggyorsító berendezésekkel jellemezhetjük.

Az első valóban nagyenergiájú gyorsító Berkeley-ben készült el. Berkeley, fix target, **Bevalac, 2.1. GeV/nukleon**, hetvenes évek, Brookhaven, fix target, **AGS, 14 GeV/nukleon**, kilencvenes évek, CERN, fix target, **SPS, 160 GeV/nukleon**, indul 1994 végén, Brookhaven, ütköző nyaláb, **RHIC, 200 GeV/nukleon**, indul 1999-ben, CERN, ütköző nyaláb, **LHC, 3200 GeV/nukleon**, indul 2004-ben.

Az új anyag előállítására a különböző gyorsítóknál rendelkezésre álló tömegközépponti energiát jobban érzékeltetjük, ha az egy nukleonpár ütközésére rendelkezésre álló invariáns energiának a nyugalmi energiával csökkentett értékét tekintjük. Ezen értékek sorozata az említett gyorsítókra: Bevalac: 0,86 GeV, AGS: 1,56 GeV, SPS: 15,4 GeV, RHIC: 400 GeV, LHC: 7200 GeV.

## Mi a vonzó a nehézion-fizikában?

Magfizikai kutatómunkámat a gyenge és az elektromágneses kölcsönhatások vizsgálatával kezdtem. Ezután a proton-atommag és a deutron-atommag reakciókat kezdtem el vizsgálni. Elsősorban az úgynevezett direkt magreakciók vonzottak, mert ezekben csak kevés szabadsági fok játszott szerepet, és ezért egyszerűen értelmezhetők voltak. Először 1969-ben, a koppenhágai Niels Bohr Intézetben hallottam szemináriumi előadást arról, hogy tandem gyorsítóval létrehozott nagyobb tömegszámú bombázó részecskével is létrehozhatnak magreakciókat. Ezek voltak a nehézion-fizika területén megtett első lépések. Meg kell azonban mondanom, hogy ez az alacsonyenergiájú nehézion-fizika nem vonzott. Túl bonyolultnak, kezelhetetlennek látszott.

A nagyenergiájú nehézion-ütközések esetén viszont a hatékony szabadsági fokok száma oly nagy, hogy elegendő az átlagértéküket számolni. Hasonlóan ahhoz, ahogyan az atomfizikáról áttértünk a kondenzált rendszerek fizikájára.

Így megint kevés átlagérték változását kell csak nyomon követnünk és megértenünk. Közepesen nagy energiákon a hadronanyag viselkedését vizsgálhatjuk, az igen nagy energián viszont a hadronok is felbomlanak, és a rendszer leírására a kvark-szabadsági fokok használata szükséges.

A nehézion-ütközések leírása akkor egyszerűsödik, ha megtaláljuk az adott energiához és jelenséghez legalkalmasabb leírási keretet. Ekkor a nehézion-ütközésekben fellépő jelenségek áttekinthetővé válnak. *Ezért szép a nehézion-fizika.*

A nehézion-ütközések leírására a fizika sok területéről vett ismereteket kell alkalmazni. Így termodinamikai, statisztikus fizikai, hidrodinamikai, térelméleti, magfizikai és részecskefizikai módszereket is használunk a folyamatok leírására. *Ezért vonzó a nehézion-fizika.*

A nehézion-fizika terén végzett kutatásainkat a következőkben néhány példa segítségével illusztráljuk.

## Maganyag

A 2.1 GeV/nukleon energia tartományban az atommagok ütközését leggyakrabban maganyaggyömbök ütközéseként értelmeztük. Az ütközésekből a maganyag állapotegyenletét akartuk egyre pontosabban megismerni. A legsikeresebbnek a Walecka által javasolt relativisztikus átlagtérelmélet bizonyult. Ennek a modellnek volt azonban egy szépséghibája.

Ha különböző tömegű barionok (például nukleonok és delta-részecskék) is vannak a rendszerben, akkor a kisebb tömegű nukleon effektív tömege nullává, sőt negatívvá válhat. Örömmel észleltük a Steve Moszkowskival végzett



munkánkban [1], hogy az általunk bevezetett, a barionok és a vonzásért felelős skalártér közötti új típusú kölcsönhatás az effektív tömeget mindig értelmes tartományban tartja. Ennek következtében a *Zimányi–Moszkowski*-modellben a maganyag összenyomhatósága is a kísérleti értékre növekszik a Walecka-modellbeli irreális értékről.

Modellünket kevés paramétere és kellemes tulajdonságai miatt sokan használták maganyag- és neutroncsillag-számolásokhoz. Példaként két ilyen cikket nevezünk meg [2], [3].

## A robbanó tűzgolyó

A nehézion-ütköztetéseknél igen nagy sűrűségű, forró anyag keletkezik. A reakció második szakaszában ez a tűzgömb szétrobban. Ezt a folyamatot is számításokkal kell követnünk. A légkörben robbanó tűzgömb önhasonló tágulásának leírására az irodalomban több cikk található. (Ez érthető, hiszen a légköri hidrogénbomba-robbantási kísérleteknél ez a reális határfeltétel.) A nehézion-reakciók során keletkező, a vákuumba robbanó tűzgömb azonban egészen másként viselkedik. Erre vonatkozó önhasonló analitikus megoldást először mi közöltünk *Jakob Bondorff*-al és *Steve Garpman*-nal közösen írt cikkünkben [4]. Ezt a megoldást is mindmáig sokan használták.

## Fázisátmenet

Bár a Berkeley gyorsító idejében a laboratóriumban még csak felforrósított maganyagot lehetett létrehozni és vizsgálni, egyre jobban teret hódított az anyag még sűrűbb és forróbb állapotának, a kvarkanyag modelljeinek elméleti vizsgálata. Ez érthetően fontos és igen érdekes terület, hiszen az ősrobbanás kezdetén az egész világunk kvarkanyagból állt.

Ez esetben nem az a kérdés, hogy vajon létezik-e az, amit keresünk, hanem csak az, hogy újból elő tudjuk-e állítani a laboratóriumban.

## Az ősrobbanás

A maganyag-kvarkanyag fázisátmenet leírására kezdetben a kvázistacionárius modelleket használták, használtuk. Ezek a modellek könnyen kezelhetők voltak. A feltevés szerint a nehézionok összeütközésekor a magok anyaga összenyomódik és felmelegszik. Ha ez a sűrűsödés elég erős, akkor az egymásba nyomódott nukleonok közti falak eltűnnek, a nukleonokban lévő kvarkok szabaddá válnak, és létrejön a nagy hőmérsékletű kvarkanyag. A  $T$  hőmérséklet és a barionsűrűséget

megadó  $\mu$  kémiai potenciál-síkon a két fázist elválasztó görbe a Gibbs-törvény alapján azon pontok halmaza, amelyeken a két fázisra vonatkozó nyomás, a bariöntéshez tartozó kémiai potenciál és a hőmérséklet azonos.

A fázishatár számításához tehát meg kell adnunk az állapotegyenleteket. A maganyagoldalon használhattuk az előbb említett relativisztikus átlagtérmodelleket. A kvarkoldalon azonban leginkább a tömeg nélküli kvark fermionok és gluon bozonok kölcsönhatásmentes gázának állapotegyenlete volt használatos. Mi indokolta ezt a közelítést?

A kvarkok és gluonok kölcsönhatásának erőssége impulzusfüggő. Minél nagyobb egy ütközésben az átadott impulzus, annál kisebb a csatolási állandó. Mármost az erősen összenyomott Fermi-gázban, mivel ugyanolyan energiájú és kvantumszámú állapotban csak egy fermion lehet, a kvarkok kényszerülnek az igen magas impulzusú Fermi-nívókat elfoglalni. Így ezek ütközésekor a csatolási állandó kicsi, a kölcsönhatások kevésbé tudják befolyásolni a rendszert.

Az előzőekben csak a könnyű kvarkokat vettük figyelembe. Érdekes újdonságot hoz a ritka kvarkok megjelenése. Megjelentek publikációk, amelyekben azt állították, hogy a ritka kvarkokhoz tartozó kémiai potenciál,  $\mu$ , ugrik a fázishatáron. Balázs Nándorral és Lukács Bélával tisztáztuk a helyzetet. Rámutatunk, hogy ez esetben a fázishatárt nem egy síkban húzódó görbe, hanem három dimenzióban egy felület adja meg [5].

A fázisátalakulást leíró görbe mentén a  $\mu$ , ritkaság kémiai potenciál folytonosan változik a kvarkanyagbeli zérus értékéről a hadronanyagbeli véges értékre. Ezen átmenet közben a rendszer kevert fázisban van. Elkülönült térfogatokban jelen van mind a kvarkfázis, mind a hadronfázis.

Külön érdekesség, hogy ez esetben a kvarkfázis elbomlásakor a pálinka desztillálásához hasonló folyamat is létrejön: ahogy a *pálinkadesztillálásnál* először az alkohol párolog el, és a hátramaradt anyag alkoholhiányos lesz, úgy a ritka kvark-antikvark párokat is tartalmazó kvarkanyagból a ritka antikvarkok mennek át először hadronfázisba, és így a hátramaradó kvarkanyagcsepp ritkaság töltést kap. Így a később hadronizáló maradék rész nagy ritkaságtöltésű, esetleg kvázistabil hadroncsöpp keletkezésére vezethet.

Itt meg kell említenünk egy fontos szempontot: definiálhatunk egy  $p_0$  impulzust, amelynél nagyobb impulzusok esetére a fenti okoskodás igaz, azaz ahol a rendszer *perturbatív*nak ( $P$ ) tekinthető. (Azaz a kölcsönhatások csak kismértvű perturbációt jelentenek.) Ha a rendszerünkben a kvarkok zömének az impulzusa ezen  $p_0$  fölött van, akkor a rendszer együttes átlagtulajdonságait nem befolyásolja jelentősen a kisebb impulzusú kvarkok *nem perturbatív* ( $NP$ ) rendszere.

Ez a feltétel különböző mértékben teljesül vagy nem teljesül a különböző gyorsítók energiatartományában.



## Jelzések (szignatúrák)

Eljutottunk tehát odáig, hogy nem ésszerűtlen feltenni, hogy létrejöhet kvarkanyag a nehézion-ütközésekben. Ekkor azonban felmerült a kérdés, hogy miből fogjuk ezt észrevenni. Más szóval, mi lesz a kvarkanyag szignatúrája? Az első válasz még Hagedorn nevéhez fűződik. Ez így hangzik: ha az anyagot igen erősen összesűrítjük, a nagy energiasűrűség kvark-antikvark párokat fog létrehozni. Mivel azonban a kvarkok fermionok, a képződő könnyű kvark-antikvark párokból a kvarkok egyre magasabb energiájú Fermi-szintet kényszerülnek betölteni. Így előbb-utóbb kevesebb energia-befektetésbe fog kerülni, hogy a majdnem zérus tömegű könnyű kvark-antikvark párok helyett nagyobb nyugalmi tömegű ritka kvark-antikvark párok jöjjenek létre.

Ennek következtében azt várhatjuk, hogy a kvarkanyag létrejöttét a ritka részecskék nagy számban való feltűnése fogja jelezni.

## Kvarkkémia és hadronkémia

Ez a megfontolás stacionárius képen alapul. De vajon a nehézion-ütközések rövid reakcióideje alatt létre tudott-e jönni az egyensúlyi értéket megközelítő számú ritka kvark-antikvark pár? E kérdés tisztázására dolgoztuk ki *Bíró Tamással a kvarkkémiai modellt* [6]. Így derült ki, a ritka kvarkok olyan gyorsan keletkeznek, hogy számuk a reakció rövid ideje alatt is megközelítheti az egyensúlyi értéket.

Így tehát elfogadhatjuk, hogy a kvarkanyag jelenlétét a ritka kvarkok számának növekedése fogja jelezni.

De hogyan fognak eloszlanı ezek a ritka kvarkok a különbözı barionok és mezonok között? Egyszerű válasz megint a kvázistacionárius fázisátmenet feltételezésével kapható.

Ha azonban az átmenet gyors, a kvázistacionárius feltételezés nem használható. Az ilyen folyamatok leírására dolgoztuk ki *Bíró Tamással az algebrai rehadronizációs modellt* [7].

Ennek alap gondolata az, hogy a ritka kvarkok elég hígan vannak jelen a rendszerben, és így hadronizáció során a ritka kvark és antikvark nem talál egymásra, nem tud megsemmisülni. Ezért a kvark fázisban jelenlévő kvarkok számát megőrző kombinációk határozzák meg a keletkező hadronok multiplicitását.

Ezen modell eredményeit hasonlítottuk össze a tisztán hadronok reakcióját feltételező *hadronkémiai modell* [8] előrejelzéseivel – ennek a modellnek az alapjait még korábban *Montvay Istvánnal* dolgoztuk ki –, és azt találtuk, hogy a K mezo-

noknak a  $\pi$  mezonokhoz viszonyított arányában várhatunk jelentős emelkedést, ha ezen részecskék a kvark-gluon plazma bomlásaként jöttek létre.

Megtaláltuk-e ezt az emelkedést az eddigi gyorsítókkal? Jelentős emelkedés már van. Az a kérdés, hogy vajon ez már a teljes emelkedés-e?

## Az ütközés modellje és a Bose–Einstein-korreláció

Hosszú ideig a Lund-húrmodell bizonyult a legsikeresebbnek a hadron-hadron ütközések leírásában. E modell szerint a nukleont egy bezáró burokban lévő három kvark együttesének tekintjük. Két nukleon ütközésekor a nukleonban lévő egyik kvark impulzust cserél a másik nukleon egyik kvarkjával. Ez a két kvark lelassul, hátramarad az érintetlen dikvarkokhoz képest. A lemaradás során a dikvark és a harmadik kvark között a bezáró burokból bezáró cső alakul ki, amelyen belül erős szín-elektromos tér (chromoelectric field) jön létre. Ez a tér kvark-antikvark párt kelt, ami a csőben a térerősség lokális megszűnésére és így a cső elszakadására és egy mezon keletkezésére vezet. A maradék cső további párkeltésekkel mezonokat hoz létre, amíg a gerjesztési energiája el nem fogy.

*Mikor keletkeznek ezek a mezonok?* Ésszerű feltennünk, hogy a gerjesztett tér minden részében ugyanakkora saját ideig tart a párkeltés. Ez azonban azt jelenti, hogy a két nukleon tömegközépponti rendszerében a különböző sebességű mezonok különböző  $t_i$  időben és  $z_i$  helyen jönnek létre:

$$t_i = \tau_0 / \sqrt{1 - (v_i / c)^2}$$

$$z_i = \tau_0 v_i / \sqrt{1 - (v_i / c)^2}$$

Tehát először a lassú mezonok jönnek létre az ütközés helyének közelében. A gyorsak később és az ütközés helyétől távol. Így feltehető, hogy a mag-mag ütközés során a primer nukleon-nukleon ütközés a magon belül történik, a keltett szekunder részecskék azonban csak a mag térfogatán kívül jönnek a világra.

Ennek alapján a primer-szekunder ütközés eleve ki van zárva. Ezen az elven alapul a lundi egyetemen kidolgozott Fritiof Monte Carlo-modell – a magok ütközésének leírására.

Az elmondottakból azonban kiderül, hogy a szekunder részecskék egy része, a lassú részecskék, a magon belül is létrejöhetnek. Ez primer-szekunder ütközésekre és így nagyobb energiasűrűségek létrejöttéhez vezet. Ezt a lehetőséget veszi figyelembe a *Csörgő Tamással kidolgozott SPACER-modellünk* [9], amelyben a részecskéket mind az impulzustérben, mind a téridőben nyomon követtük.



E modellel analizálva a korai SPS-mérések eredményeit, megállapítottuk, hogy a keletkezett részecskék impulzusának és téridőbeli rapiditásának erős korrelációja miatt a keletkezett anyag olyan, mint egy a tér-idő rapiditással ( $\eta$ ) skálázó rapiditású ( $y$ ) lokális T hőmérsékletű részecskék halmaza.

Nem relativisztikusan kifejezve: a részecskék  $z$  irányú sebessége a részecske  $z$  helykoordinátájával monoton növekvő kapcsolatban áll.

Az így bevezetett teljes fázistérbeli leírás tette lehetővé, hogy Csörgő Tamással a „tűzgolyó kifagyáskori méretét” számoljuk a pionok *Bose–Einstein-korrelációja* révén [10]. Ezt a módszert először Hanbury-Brown és Twiss alkalmazta a csillagászatban a csillagok átmérőjének a meghatározására.

E módszer analízise sok új, meglepő eredményt hozott és hoz még manapság is.

## Az SPS ütközéseiben keletkező anyag

Az alacsonyabb energiákon jó közelítéssel működő modellek számára problémát okoznak az SPS Pb+Pb ütközésekben észlelt adatok. A mérésekben talált nagy transzverzális impulzusok létrehozásához az egyszerű húrmodellen alapuló leírások nem elegendők. Az RQMD (Relativistic Quantum Molecular Dynamics) modellben a húrok összeolvadásából keletkező színekötél (color-rope) képet kellett használni (ezt a modellt Bíró Tamás publikálta korábban). Ez azt jelenti, hogy sok kvark együttesen alakít ki egy nagy szín-elektromos teret, és ez kelti az új kvark-antikvark párokat.

A Lund-húrmodellen alapuló VENUS nevű Monte Carlo-program (Klaus Werner munkája) nyomon követi a beérkező nukleonokat. Azt tapasztalták, hogy némely térrészekben a nukleonok oly sűrűen vannak, hogy azokat már nem lehet önálló nukleonoknak tekinteni. A VENUS-modellben ezekre a helyekre kvark-gluon plazmacsöppeket raknak be.

## Az ALCOR-modell

Milyen is lehet az állapot valójában, amely az SPS Pb+Pb reakcióban kialakul?

T. Hatsuda néhány éve rács-színdinamikai számolások analízisével kimutatta, hogy a maganyag-kvarkanyag fázisátmenet helyét megadó  $T_c$  hőmérsékletnek kb. 2-3-szorosánál kezd a rendszer úgy viselkedni, mint egy kis kölcsönhatású kvark-gluon plazma. A  $T_c$  hőmérséklet körül azonban a jellemzők nagyon eltérnek a szabad plazma jellemzőitől. Ez érthető is, hiszen  $T_c$  körül a kvarkok átlagos impulzusa elég kicsiny, inkább a nukleonon belüli értékhez ( $\Delta p_c = \hbar c / \Delta x = 200 \text{ MeV}$ ) van közelebb, mint a szabad plazmára jellemző

1. táblázat

Hadrongyakoriságok az SPS-nél 200 GeV/nukleon energiájú S+S ütközésben. A kísérleti adatokat a CERN NA35 együttműködés méréséből [12], [13] idézzük. A kísérleti adatok mellett mutatjuk az ALCOR-modellünkkel kapott eredményeket. Úgyszintén feltüntetjük a HIJING [14]- és RQMD-modellek eredményeit

S+S	DATA	ALCOR	HIJ.01	RQMD
$h^-$	$98 \pm 3$	100,2	88,80	110,2
$\pi^+$	–	88,14	–	–
$\pi^0$	–	88,14	–	–
$\pi^-$	$91 \pm 3$	88,14	79,60	–
$K^+$	$12,5 \pm 0,4$	12,70	8,43	–
$K^0$	–	12,70	–	–
$\bar{K}^0$	–	6,36	–	–
$K^-$	$6,9 \pm 0,4$	6,36	6,27	–
$K_S^0$	$10,5 \pm 1,7$	9,53	7,23	10,0
$p^+$	–	22,04	–	–
$n^0$	–	22,04	–	–
$\Sigma^+$	–	1,71	–	–
$\Sigma^0$	–	1,71	–	–
$\Sigma^-$	–	1,71	–	–
$\Lambda^0$	–	8,54	4,58	7,76
$Y^0 = \Sigma^0 + \Lambda^0$	$9,4 \pm 1,0$	10,25	–	–
$\Xi^0$	–	1,13	–	–
$\Xi^-$	–	1,13	0,04	–
$\Omega^-$	–	0,19	–	–
$\bar{p}^-$	–	2,35	–	–
$\bar{n}^0$	–	2,35	–	–
$\bar{\Sigma}^-$	–	0,40	–	–
$\bar{\Sigma}^0$	–	0,40	–	–
$\bar{\Sigma}^+$	–	0,40	–	–
$\bar{\Lambda}^0$	–	1,98	0,86	–
$\bar{Y}^0 = \bar{\Sigma}^0 + \bar{\Lambda}^0$	$2,20 \pm 0,4$	2,38	–	–
$\bar{\Xi}^0$	–	0,57	–	–
$\bar{\Xi}^+$	–	0,57	0,06	–
$\bar{\Omega}^+$	–	0,21	–	–



impulzusokhoz. Az SPS Pb+Pb ütközésénél viszont éppen  $T_c$  körüli energiasűrűség alakul ki.

Ennek alapján felmerül a gondolat, hogy vajon nem lehetne-e a kialakult állapotot egy  $T=180\text{--}200$  MeV körüli hőmérsékletű konstituens kvarkképpel leírni. Az *ALCOR*-modellben [11] ennek a képnek megfelelő konzisztens leírást dolgoztunk ki Lévai Péterrel és Bíró Tamással.

Feltesszük, hogy a mag-mag ütközés eredményeként effektív tömeggel rendelkező kvarkok vannak jelen a rendszerben, melyek impulzuseloszlása a relativisztikus Jüttner-eloszlást veszi fel. Ezt a feltevést a korábban már említett SPACER-moddellel végzett vizsgálatok is sugallják. Az eloszlásfüggvény alakja:

$$f(x, p) = e^{-\frac{1}{T}u(x)^\mu p_\mu},$$

ahol az  $u(x)$  sebességmező egy véges tartományon skálázó eloszlású. Ez az eloszlásfüggvény annak felel meg, hogy egy skálázó átlag sebességtér minden együtt mozgó cellájában ugyanaz a relativisztikus Boltzmann-elosztás adja meg a kvarkok impulzuseloszlását. A modellben összesen három hatékony paraméter van.

Az *ALCOR*-modellben a kvarkoknak a hadronokba való kötődését számítjuk ki a modell feltevései alapján. Így megkapjuk a legalacsonyabb energiájú két mezon-oktett, valamint a barion-oktett és dekuplett elemeinek multiplícitását. A multiplettekben szereplő rezonanciák elbomlásának figyelembevételével jutunk el a mérhető hadroneloszláshoz.

A CERN SPS gyorsítójával végzett 200 GeV/nukleon energiájú  $S+S$  ütközésben keletkező részecske összetételre az *ALCOR*-modellel végzett számításaink eredményét és a mérési eredményeket mutatja az 1. és a 2. táblázat.

2. táblázat

Ritka barion- és antibarion- arányok a WA94 együttműködés [15] szerint  
a 200 GeV/nukleon energiájú  
 $S+S$  reakcióban, az *ALCOR*-eredményekkel együtt

$S+S$	WA94	ALCOR
$\bar{Y}^0/Y^0$	$0,23 \pm 0,01$	0,23
$\bar{\Xi}^-/\Xi^-$	$0,55 \pm 0,07$	0,50
$\Xi^-/Y^0$	$0,09 \pm 0,01$	0,11
$\bar{\Xi}^-/\bar{Y}^0$	$0,21 \pm 0,02$	0,24

3. táblázat

Hadron-multiplícitások a  $p+n$  és  $p+p$  reakciókban: kísérleti adatok [16] és az ALCOR-modell eredményei a 200 GeV/nukleon bombázó energiánál. A szögletes zárójelben lévő számok a  $p+p$  és a  $n+n$  reakciók átlagát jelentik. A gömbölyű zárójelben lévő számok 50%-os bizonytalansággal megadott értékek

	$p+n$	ALCOR	$p+p$	ALCOR
$h^-$	$3,23 \pm 0,02$	3,24	$2,85 \pm 0,03$	2,87
$\pi^+$	$3,01 \pm 0,04$	3,03	$3,22 \pm 0,12$	3,43
$\pi^0$	$3,06 \pm 0,25$	3,03	$3,34 \pm 0,24$	3,01
$\pi^-$	$3,01 \pm 0,04$	3,03	$2,62 \pm 0,06$	2,67
$K^+$	[0,24]	0,28	$0,28 \pm 0,06$	0,28
$K^-$	[0,17]	0,12	$0,18 \pm 0,05$	0,12
$K_S^0$	[0,20]	0,20	$0,17 \pm 0,01$	0,20
$p^+$	$1,00 \pm 0,08$	0,88	$1,34 \pm 0,15$	1,10
$n^0$	$1,00 \pm 0,08$	0,88	$0,61 \pm 0,30$	0,65
$Y^0 = \Sigma^0 + \Lambda^0$	[0,096]	0,23	$0,096 \pm 0,01$	0,22
$\bar{p}^-$	(0,05)	0,03	$0,05 \pm 0,02$	0,03
$\bar{n}^0$	(0,05)	0,03	(0,05)	0,03
$\bar{Y}^0 = \bar{\Sigma}^0 + \bar{\Lambda}^0$	(0,013)	0,019	$0,013 \pm 0,004$	0,019

### Az ALCOR-modell a mérési adatokkal jó egyezést mutat

Hasonló számítást és a kísérlettel való összehasonlítást végeztünk el a 200 GeV/A energiájú proton-proton és proton-neutron ütközésekre. Ennek eredményét mutatja a 3. táblázat. Ahhoz azonban, hogy ez az egyezés létrejöjjön, le kellett csökkenteni a részt vevő nukleonpárra jutó keltett kvark-antikvark párok számát, és úgyszintén csökkenteni kellett a ritka kvark-antikvark párkeltés relatív arányát.

Ez arra utal, hogy a nehézion-ütközésekben más mechanizmus is működik, mint a nukleon-nukleon ütközésekben.



## Következtetések

A számított értékeknek a mérési eredményekkel való elég jó egyezéséből arra lehet következtetni, hogy az ALCOR-modell alapfeltevései elég jól teljesülnek:

- Az SPS  $S + S$  reakcióban más mechanizmusok is fellépnek az elemi folyamatokban, mint a szabad nukleon-nukleon ütközésekben.
- Az SPS  $S + S$  reakcióban több kvark-antikvark pár keletkezik részt vevő nukleononként, mint az egyszerű nukleon-nukleon ütközésben.
- Az SPS  $S + S$  reakcióban keltett ritka kvark-antikvark párok száma a könnyű kvark-antikvark párok számához viszonyítva jelentősen megnövekedett (1,6-os faktoral).
- A mérési adatok nem mondanak ellen annak a feltevésnek, hogy az SPS  $Pb + Pb$  ütközésben kialakul valamilyen fajta, effektív tömeggel rendelkező, kvarkokból álló anyag (ez nem a kölcsönhatásmentes kvark-gluon plazma).
- A kvarkanyag hadronizációja lokálisan gyorsan megy végbe (ámbár a teljes hadronizáció állhat az ilyen gyors lokális hadronizációk egymás utáni sorozatából).

A közeljövő mérései fogják megmutatni, hogy ezen az úton lehet-e továbbhaladni megfontolásainkkal, vagy valami más utat kell keresnünk.

## Köszönetnyilvánítás

Először is köszönettel tartozom feleségemnek, Zimányi Magdolnának, mind a számítógépek és a számítógép-hálózatok lelkivilágának megértése területén, mind pedig a munkánk során felmerült egyéb problémák megoldásában nyújtott folytonos támogatásáért.

Köszönöm fiatalabb munkatársaimnak, Bíró Tamás, Csörgő Tamás, Lévai Péter, Lukács Béla kollégáimnak, hogy megéreztek e terület szépségét, és lelkesedésükkel, kitartó munkájukkal segítettek a budapesti nehézion-fizikai műhely építését.

Köszönöm továbbá kollégáimnak az RMKI Elméleti Fizikai Főosztályán, hogy együttesen kellemes és a hatékony munkát segítő légkört alakítottunk ki és tartottunk fenn.

Végezetül köszönettel tartozom nagyszámú külföldi kollégámnak, akik meghívásokkal, együttműködésekkel segítettek azokban az időkben is, amikor a kutatómunkához nélkülözhetetlen külföldi utazás sokkal kevésbé volt lehetséges, mint manapság.

## Irodalom

1. Zimányi, J., Moszkowski, S. A.: Nuclear equation of state with derivative scalar coupling. *Phys. Rev.*, C 42, 1416 (1990)
2. Delphino, A., Coelho, C.T., Malheiro, M.: Nuclear matter properties for modified Zimányi-Moszkowski models. *Phys. Lett.* B 345, 361 (1995).
3. Aguirre, R., Civitarese, O., de Paoli, A. L.: The Zimányi and Moszkowski model in thermo field dynamics. *Nucl. Phys.*, A 597, 543 (1996).
4. Bondorf, J., Garpman, S., Zimányi, J.: A simple analytic hydrodynamic model for expanding fireballs. *Nucl. Phys.*, A 296, 320 (1978).
5. Lukács, B., Zimányi, J., Balázs, N. L.: Thermodynamical considerations for the rehadronizations of a quark-gluon plasma. *Phys. Lett.*, 183 B, 27 (1987)
6. Bíró, T. S., Zimányi, J.: Quarkochemistry in relativistic heavy ion collisions. *Phys. Lett.*, 113 B, 6 (1982).
7. Bíró, T. S., Zimányi, J.: Quark-gluon plasma formation in heavy ion collisions and quarkochemistry, *Nucl. Phys.*, A 395, 525 (1983).
8. Montvay, I., Zimányi, J.: Hadronchemistry in heavy ion collisions, *Nucl. Phys.*, A 316, 490 (1979).
9. Csörgő, T., Zimányi, J., Bondorf, J., Heiselberg, H.: Birth of hot matter in relativistic heavy ion collisions, *Phys. Lett.*, 222 B, 115 (1989).
10. Csörgő, T., Zimányi, J., Bondorf, J., Heiselberg, H., Pratt, S.: Two-pion correlations from SPACER. *Phys. Lett.*, 241 B, 301 (1990).
11. Bíró, T. S., Lévai, P., Zimányi, J.: ALCOR: a dynamical model for hadronization. *Phys. Lett.*, 347 B, 6 (1995).
12. J. Baechler et al, *Z. Phys.*, C 58, 367 (1993).
13. NA35 Coll. t. Alber et al., IKF-HENPG/1-94 Univ. Frankfurt preprint.
14. Wang, X. N., Gyulassy, M.: *Phys. Rev.*, D 44, 3501 (1991).
15. WA94 Collaboration, O. Villalobos-Baillie, *Proceedings of Strangeness in hadronic matter conference*, Tucson, 1995, 259.
16. Gazdzicki, M., Hansen, O.: *Nucl. Phys.*, A 528, 754 (1991).



Vicsek Tamás

az MTA levelező tagja

# A TERMÉSZET GEOMETRIÁJA

Elhangzott 1996. május 23-án

A természetben előforduló objektumok (hegyek, fák, folyó- és érhálózatok, stb.) nem egyenesek, körök vagy kockák, hanem sokkal összetettebb formák. Az ilyen bonyolult geometriával bíró, ún. fraktálok kialakulásának leírása/megértése terén az elmúlt másfél évtizedben jelentős áttörés történt. A fraktálgeometria rövid áttekintése után összefoglalom néhány a témakörben elért eredményünket. Bemutatom, hogyan lehet a fraktál hegygerincek kialakulását kísérletileg modellezni, valamint beszámolok a komplex szerkezetű baktériumtelepek létrejöttének okaira irányuló vizsgálatainkról. Végül ismertetem az élőlények kollektív mozgását leíró modellünkben megfigyelhető érdekes átmeneteket.

## Bevezetés

Az ókori tudósok részéről csodálatos szellemi teljesítmény volt, hogy a környezetükben fellelhető formák absztrakciója segítségével felfedezték az egyszerű geometriai elemeket – az egyenest, a háromszöget, a kört, a síkot és a többi jól ismert szabályos alakzatot. A klasszikus euklideszi geometria iránti érdeklődést azóta is motiválta, hogy a természet néhány alapvető jelentőségű objektumára jól alkalmazható volt. Az ellipszis fontossá vált mint a bolygópályák, a gömb pedig mint Földünk alakja. Természetesen ezek a pályák nem teljesen elliptikusak, és a Föld sem gömb valójában, de számos esetben – pél-

dául a bolygómozgás előrejelzésében vagy a Föld gravitációs mezőjének vizsgálatában – ezek a közelítések tökéletesen megfeleltek. Az elméleti természettudomány hagyományos modelljei a számítások alkalmazhatósága érdekében általában sima görbéket és felületeket tételeztek fel.

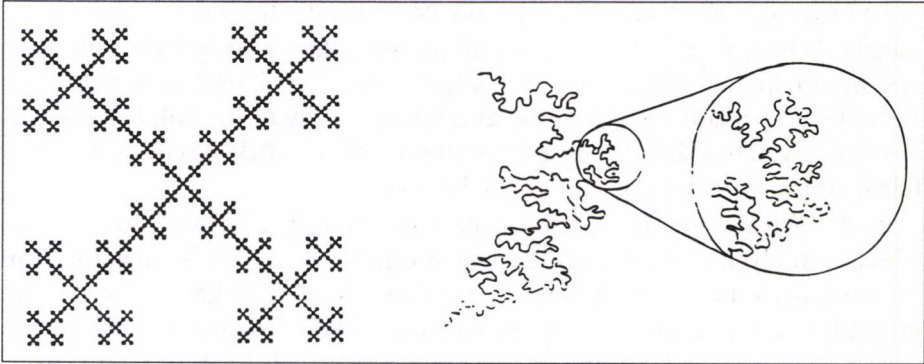
Ha azonban körülnézünk a világban, láthatjuk, hogy „a felhők nem gömbök, a hegyek nem kúpok, a tengerpart vonala nem körív, a fa kérge nem sima, és a villám sem egyenes vonalban halad” [1]. A csipkézett szélű felhők, a szigetek vagy tavak partvonalai, a hegyek többnyire sziklával vagy kisebb-nagyobb kiszögellésekkel tagolt felülete, a millió finom kis részlettel bíró, egymástól is különböző hópehelyalakzat, az ágas-bogas fák (lombkoronájuk nélkül), az égen átcikázó villám, a hold kráterekkel lyuggatott felülete és számos más természeti objektum egyáltalán nem sima, és sok nagyítási skálán is részletesen struktúrált. A természetben található formák sokkal változatosabbak, bonyolultabbak, mint a fent említett egyszerű alakzatok; „fittyet hánynak az euklideszi geometriának”, amelynek segítségével csak korlátozottan írhatók le.

Már a századforduló tájékán akadtak matematikusok, akik vizsgáltak rendkívül szabálytalan, mások által patológikusnak tartott görbéket és felületeket. Benoit Mandelbrot (litván származású matematikus, aki Franciaországban nőtt fel; jelenleg a New York állambeli T. Watson IBM-központ kutatója és a Yale egyetem professzora) 1975 körül hívta fel a figyelmet egyes bonyolult geometriájú alakzatok alapvető jelentőségére a természettudományokban és más területeken [1].

A fraktálobjektumok egyik közös tulajdonsága az is, hogy *önhasonlók*, skálainvariánsak. Ez azt jelenti, hogy ha először kivágunk egy részt belőlük, majd a kivágott darabot felnagyítjuk, az eredményül kapott alakzat (statisztikai értelemben) ugyanúgy fog kinézni, mint az eredeti (1. ábra). Például, ha egy repülőgépről lefényképezzük Norvégia fjordokkal tarkított partvonalát, akkor az így kapott bonyolult vonalról nyert általános benyomásunk eléggé hasonló lesz ahhoz a képhez, amit lényegesen közelebből, a sziklával szabdalatt parton állva látnánk.

Vagy képzeljük el, hogy letörünk egy szerteágazó faágat (télien, amikor nincsenek levelek rajta), és elsétálunk vele a fától néhány méterre, majd az ágat karnyújtásnyira tartva egyszerre nézzük a kezünkben tartott ágat és a fát. A két látvány igen hasonló lesz. Természetesen mindegyik egymástól nagyon különböző fa csak a saját ágaival önhasonló, a fenti kísérlet nem ismételhető meg, mondjuk, egy kőrisfa és egy fenyőág összevetésével. Az élővilágban az önhasonló geometria gyakran fontos funkcióval bír; például a fák esetében kis súly mellett nagy felületet biztosít, így az energiafelvétel-súly arány optimalisabb.





1. ábra. A geometriai önhasonlóságot úgy kell elképzelniünk, hogy az ezzel a tulajdonsággal rendelkező alakzat egy kis részét kinagyítva olyan ábrát kapunk, amelyik az eredetitől jellegében nem különbözik. Másképpen: a hosszúságskála változtatásakor minden léptéken túl egyre finomabb részletek jelennek meg, és ezek a részletek úgy viselkednek, mint az egész

A természetben előforduló fraktálok tulajdonságainak elméleti, kísérleti és számítógépes vizsgálatával az 1980-as évek elején kezdtem el foglalkozni. Azóta sok, a fraktálokkal kapcsolatos jelenséget tanulmányoztunk számos kollégával való együttműködésem során. Köszönetet mondok mindegyiküknek, elsősorban Kertész Jánosnak, Horváth Viktornak, Barabási Lászlónak, Czirók Andrásnak, Fereydoon Familynek, Paul Meakinnek, Benoit Mandelbrotnak és Eugene Stanleynek.

A terjedelmi korlátokra való tekintettel a jelen munkában néhány témát tudok csak vázlatosan érinteni. A fraktálgeometriára vonatkozó rövid áttekintés után összefoglalom az önaffin fraktálgeometriával rendelkező hegygerincek kialakulására, a komplex geometriával rendelkező baktériumtelepek növekedésére és a kollektív mozgások leírására irányuló kutatásaink eredményeit.

## Fraktálgeometria

A fraktálok két fő alaptípusát különböztetjük meg [1, 2]. A *térfogati* vagy *önhasonló* fraktálokra az a jellemző, hogy amikor egyre növekvő  $R$  sugarú tartományokat hasítunk ki belőlük, akkor az így kivágott rész tömege ( $M$ ) vagy térfogata a sugár tört (fractio) hatványával nő:

$$M(R) \sim R^D. \quad (1)$$

Itt  $D$  az úgynevezett fraktáldimenzió. Nyilvánvaló, hogy közönséges testek esetében  $D=d$ , ahol  $d=1, 2$  vagy  $3$ , attól függően, hogy a vizsgált objektum egy egyenes mentén, a síkon vagy a térben helyezkedik-e el. Fraktálokra azonban  $D < d$ , tehát például a háromdimenziós térben relatív térfogatuk  $R^D/R^d \rightarrow 0$ , ha  $R \rightarrow \infty$ . Az ilyen fraktálszerkezetű objektumok önazonosak: ha egy kis részüket felnagyítjuk, visszakapjuk a teljes objektumot.

A felületi avagy önaffin fraktálok sehol sem differenciálható folytonos függvények, amelyek szintén rendelkeznek az önazonosság egy formájával, amit önaffinitásnak neveznek. Ebben az esetben a felületi fraktál egy kis részét kiragadva, azt anizotróp (irányfüggő) módon kell felnagyítanunk, hogy a kapott objektum egybevágjon a teljes eredeti fraktállal. Az ilyen függvényekre igaz, hogy az átlagos változásuk ( $\langle |\Delta Y(x)| \rangle$ ) valamilyen hatvány ( $H$ ) szerint nő annak a tartománynak a kiterjedésével ( $\Delta x$ ), amelyen a változást mérjük

$$\langle |\Delta Y(x)| \rangle \sim (\Delta x)^H. \quad (2)$$

A természeti jelenségek közül igen sok vezet a fenti két típusú fraktál valamelyikéhez. Térfogati fraktálnak megfelelő szerkezetűek például a villámok, a dendrites kristályok (hópelyhek) vagy a különböző viszkozitású folyadékok egymásba hatolásakor kialakuló mintázatok. Ha molekulákkal bombázzunk egy felületet, az összetapadt molekulák egy önaffin felületet képeznek, de a (2) egyenlet szerint viselkedő felületet (vonalat) kapunk akkor is, ha egy itatóspapírt vízszintes szélével belemártunk egy színes folyadékba (pl. kávéba), és a nedvesedő terület határát tekintjük.

\*

Bár a fentiekben tárgyalt geometria sem túl egyszerű, a teljes képhez hozzátartozik, hogy számos természeti jelenség leírására még a közönséges fraktálokénál is összetettebb struktúrákra van szükség.

Ha egy fraktálgeometriával rendelkező fizikai objektum kölcsönhatásba kerül a környezetével, akkor a fraktál felülete mentén kialakul az adott körülményekre és geometriára jellemző eloszlás. Például ha egy komplikált felületű vezető anyagot elektromosan feltöltünk, akkor a felülete közvetlen közelében az elektromos tér nagyon nagy ingadozásokat mutat. Itt a csúcshatás és az árnyékolás jól ismert jelensége következtében a kiugró részeknél igen nagy, az öblös részek belsejében viszont közel nulla a térerősség, ami a cizellált fraktálfelületek esetében rendkívül élesen változó eloszlást eredményez a térerősségben.

Az ilyen eloszlás többnyire annyira bonyolult, hogy csak fraktáldimenziók végtelen hierarchiájával írható le.



## Fraktál hegygerincek kialakulása eróziós modellkísérletekben

### Motiváció

Feltehetően sokunk gyönyörködött már a magasabb mészkőhegységekben, például az Alpokban vagy a Kárpátokban látható változatos tájakban. Különösen megkapóak a festőien cizellált hegygerincek, amelyek környezete kedvelt célpontja a szép tájak látványa iránt vonzódó, kikapcsolódást kereső utazóknak, turistáknak. Gondolt-e azonban a kedves Olvasó arra, hogy milyen folyamatok eredményeként alakultak ki ezek a fenségesen szép hegyláncok? A válasz nem is olyan egyszerű, hiszen a formáknak előbb említett gazdagsága emberi léptékkal mérve nagyon hosszú idő alatt jön létre a mészkőhegységekben, ezért a pusztta megfigyelés útján való közvetlen megismerés nem járható út.

A következőkben szeretném bemutatni azokat a lehetséges mechanizmusokat, amelyek bonyolult szerkezetű hegygerincekhez vezethetnek. A geomorfológiai fejlődés tanulmányozására alkalmazott újszerű módszerünk lényege az volt, hogy a természetben nagy méretskálán végbemenő folyamatokat megpróbáltuk *kísérleti úton kicsiben, a laboratóriumban „lejátszani”* [3].

*Miért modellkísérletek?* Mint említettem, a mészkőhegységek szerkezetének kialakulása tipikusan több száz millió évig tart. Nyilvánvalóan reménytelen vállalkozás megfigyelés útján direkt tapasztalatot szerezni a lejátszódó eróziós folyamatokról, ezért a hátrahagyott nyomok alapján csak különböző feltevésekre van mód. Egészen más a helyzet egy modellkísérletben, ahol néhányszor 10 perc alatt közvetlenül megfigyelhetjük, amint az eredetileg sima felület feldurvul, és struktúrája hasonlatossá válik a hegységekéhez.

### Kísérleti hegyek

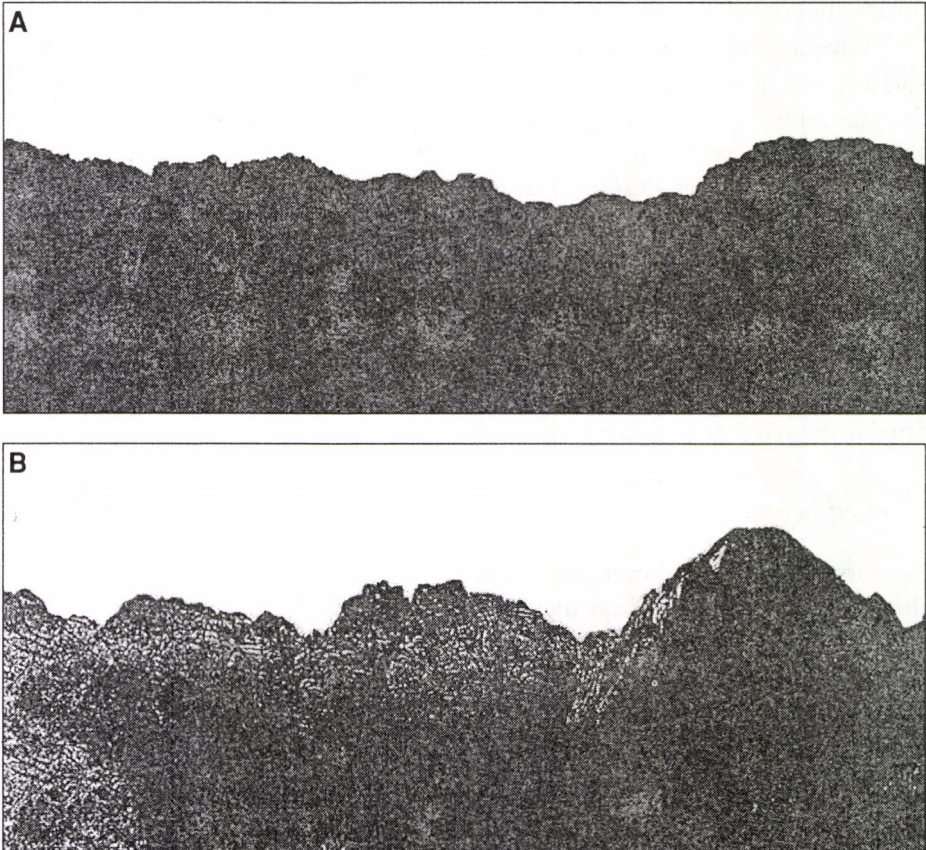
Korántsem egyszerű félméteres skálán hegyormokhoz vezető kísérletet összeállítani. Hosszas próbálkozás után jutottunk az alábbi rendszerhez:

1.) Elkészítettünk egy keveréket, amely fele-fele arányban állt közönséges, építkezéseken használatos kvarchomokból és virágföldből. Az általunk használt anyag jobb ismerete érdekében scanning elektronmikroszkóp és digitális képanalízis segítségével megállapítottuk a részecskék méreteloszlását a keverékben, és úgy találtuk, hogy a homokszemcsék átlagos mérete  $150\ \mu$  körül volt, míg a virágföldben ennél jóval kisebb, de sokkal nagyobb részecskék is előfordultak. 2.) A keveréket kissé átnedvesítettük, és egy sima felületű „hegyet” alakítottunk ki belőle. Ez a hegygerinc egy alulról felfelé keskenyülő,

hosszirányban elnyújtott gúla formájú volt, és hosszúkás téglalap alakú teteje (a fennsík) mérete 60x18x4 cm volt. 3.) A kísérlet alatt 1500–3000 cm<sup>3</sup>/min sebességgel vizet permeteztünk erre a struktúrára, amelynek felülete az elfolyó víz által elszállított anyag és a mini földcsuszamlások hatására fokozatosan egyre durvábbá vált.

### *A kísérleti és a valódi hegyek hasonlóságáról*

A kísérleti eredmények kiértékelési módja miatt elsősorban a kialakult hegyek profilját vagy másképpen kontúrját vizsgáltuk. Ebből a célból háttérmegvilágítást alkalmaztunk, és úgy készítettünk felvételeket a kísérleti hegygerincekről. A 2a ábra egy ilyen felvételt mutat, míg a 2b ábrán egy valódi hegy

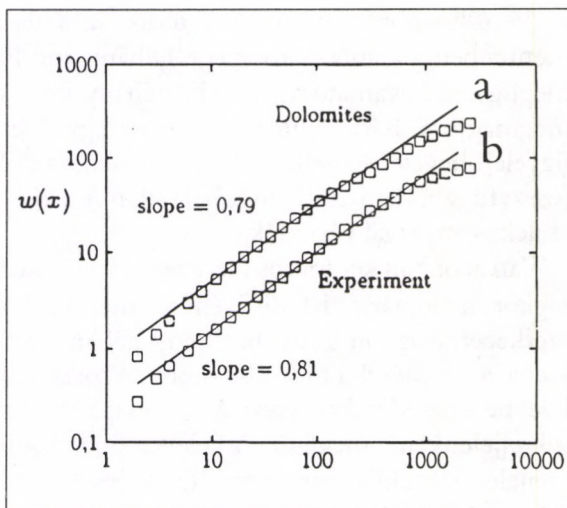


2. ábra. Egy kísérleti (a) és egy valódi (b) hegyprofil vizuális összevetése



látható, amelyet az Alpok olaszországi részén található Dolomitokról készült kép alapján reprodukáltunk. A két ábra jellegének figyelemre méltó hasonlósága jól demonstrálja, hogy a fraktálszerkezetű objektumok esetében nagyon különböző méretskálákon látható hasonló viselkedés, és ez a viselkedés létrejöhet erózió útján.

A kontúrok mint függvények kezelhetők, és ezért a (2) összefüggés teljesülését a megfelelő mennyiségek kiszámítása útján ellenőrizhetjük. Ábrázoljuk tehát az  $x$  kiterjedésű tartományok átlagos vastagságát! Ha  $\log w$  (a vastagság logaritmusa)  $\log x$  függvényében lineárisan nő, akkor teljesül a  $w \sim x^\alpha$  összefüggés, és a lineáris szakasz meredeksége éppen az  $\alpha$  exponens lesz. A 3. ábrán egy kísérleti és egy valódi hegygerinc kontúrjának kiértékeléséből nyert eredményt mutatunk be. Az adatok egy viszonylag hosszú tartományon át közel lineárisan változnak, és a kísérleti, valamint a valódi hegy profiljához tartozó meredekség- (durvasági exponens) értékek igen hasonlóak.



3. ábra. Kísérleti (a) és valódi (b) hegygerincekre meghatározott  $w$  vastagság-függvény logaritmikus skálán ábrázolva. A kísérleti és a valódi hegyre vonatkozó adatok egyaránt közel fekszenek a rajtuk áthúzott, kb. 0,8 meredekségű egyenesekhez. Ez a tény a hegygerincek önaffin jellegét igazolja

### Következtetések

Kísérleteinkben az eróziós folyamatok által létrehozott, festői, de a gyakorlat szempontjából is fontos geomorfológiai típust, a fraktál hegyeket vizsgáltuk. Megfigyeléseink egyik alapvető tanulsága, hogy a valódi hegygerincekkel rokon struktúrák elsősorban a földcsuszamlásos mechanizmussal alakulnak ki. Másfelől ez a mechanizmus csak akkor alakít ki fraktál hegyeket, ha a földcsuszamlások mérete egy széles tartományban változik; a sok kicsi beomlás mellett nem túl kis valószínűséggel jönnek létre „nagy”, a kísérleti hegy méretével összemérhető földcsuszamlások.

Az Olvasóban nyilván felvetődik az a természetes kérdés, hogy vajon mennyiben alkalmazhatóak egy néhányszor 10 cm-es kísérleti objektumon megfigyelt folyamatok a valódi, néhány km-es skálán lejátszódó jelenségek megmagyarázására. Különösen jogos egy ilyen felvetés annak a ténynek a figyelembevételével, hogy például az Alpok alapvetően mészkőből (összefüggő, „kemény” anyagból) áll, míg a kísérletet egy könnyen átázó, morzsálékos anyaggal végeztük.

Van azonban két fontos észrevétel, amely közvetve alátámasztja a két jelenségkör analógiáját. 1.) Elsőként kiemeljük, hogy a mészkőhegységek belső szerkezete nagyon bonyolult, lényegében a teljes kőállandó átmegáztatva van szelvé a repedések hol finom, hol makroszkopikus (szintén fraktál) hálójával. Ezekbe a repedésekbe beszivárog a csapadék, és a hőmérséklet csökkenésekor (pl. éjjelenként) megfagy. A keletkező jég tágulása miatt kialakuló feszültség széjjelebb feszíti a már meglevő repedéseket, és egyúttal új repedéseket is létrehoz. Az eredetileg összefüggő sziklák egyre kevésbé kapcsolatban levő kisebb egységekre hasadnak szét. 2.) Abban a pillanatban, amikor a kapcsolat egy kiterjedt tartomány körül végleg meggyengül (a repedéshálózat egy felület mentén összefüggővé válik), ez a tartomány leomlik. A következő kép rajzoldódik tehát ki: A kísérletünkben használt homok- és földszemcsék a repedések által szétszabdalt sziklákat alkotó kődaraboknak felelnek meg, míg a beszivárgó, az összetapadt szemcséket egymástól elválasztó víz a köveket szétfeszítő jég módjára hat. Tehát: földcsuszamlás → kőomlás. Valóban, a Dolomitokban található hegyek lábainál hatalmas mennyiségű kőtörmelék figyelhető meg, amit a völgyekben folyó víz fokozatosan felold, ill. elszállít.

## Fraktál baktériumtelepek kialakulása

A biológiában a legkülönbözőbb eredetű, gazdag mintázatú fraktálokkal találkozhatunk [2] – gondoljunk csak a (leveleit vesztett) fák sűrűn elágazó, különböző méreteken ismétlődő struktúrájára vagy éppen a testünket átszövő finom érhalózatra! De egyes sejteknek is lehet fraktálgeometriája, vannak idegsejtek, amelyek sok ezer ágas-bogas nyúlvánnyal rendelkeznek. Itt most egy fizikai koncepciók alapján interpretálható biológiai fraktálról fogok írni.

### *Kísérletek baktériumtelepekkel*

A Petri-csésze egy lapos üvegtálka, függőleges oldalfalakkal. Ha ebbe valamilyen szerves tápanyagot (pl. peptont) tartalmazó zselét teszünk (a zselében a tápanyag jól tud diffundálni), és a tálka közepén a zselé felületére egy baktériu-



mokat tartalmazó folyadékcseppet helyezünk, a baktériumok osztódásnak indulnak. Pár nap alatt a felületen kialakul a baktériumtelep, amelyik rendszerint kör alakú, mert a tápanyag korlátlan mennyiségben hozzáférhető a telep felületén levő baktériumok számára.

A baktériumtelepek azonban gyakran igen kedvezőtlen környezeti feltételek között is képesek fejlődni. 1989-ben egy japán kutató megfigyelte, hogy a baktériumtelepben kialakulhatnak olyan bonyolult növekedési mintázatok, amelyeket korábban élettelen rendszerek nem egyensúlyi növekedési folyamataiban figyeltek meg. Az első kísérleti eredmények arra utaltak, hogy viszonylag *kevés tápanyag* jelenlétekor a tápanyagnak a zselében való diffúziója, valamint a baktériumok jellegzetes mozgása határozza meg a telepek ilyenkor igen bonyolult alakját.

Külföldi társszerzőinkkel való együttműködésünk során először a kísérleti úton növesztett baktériumtelepek geometriai tulajdonságait vizsgáltuk [4]. A különböző növekedési feltételek mellett végzett kísérletekben a paraméterek változtatása kiterjedt az alacsony tápanyagtartalomtól (0,1 g pepton/l) a táplálékban gazdag keverékig (10 g pepton/l) és a lágy szubsztrátumtól (1% agarkoncentráció) a keményig (4% agarkoncentráció). A telepek egy kb. 10 cm átmérőjű, csészealj formájú edény (Petri-csésze) alján elhelyezkedő, 3 mm vastag, tápanyagot (peptont) tartalmazó, zselészerű (agar-) réteg felületén növekedtek.

A növesztést 37 °C és 30% páratartalom mellett tartott Petri-csésze közepébe fecskendezett  $5\ \mu\text{l} \sim 10^5$  baktériumot tartalmazó cseppel kezdtük. A továbbiakban említett növekedési mintázatok a *Bacillus subtilis* 168-as számú tenyészetéből származó bacillusok hozták létre. (Ez egy közönséges, az emberi táplálékban tipikusan előforduló baktériumfajta.)

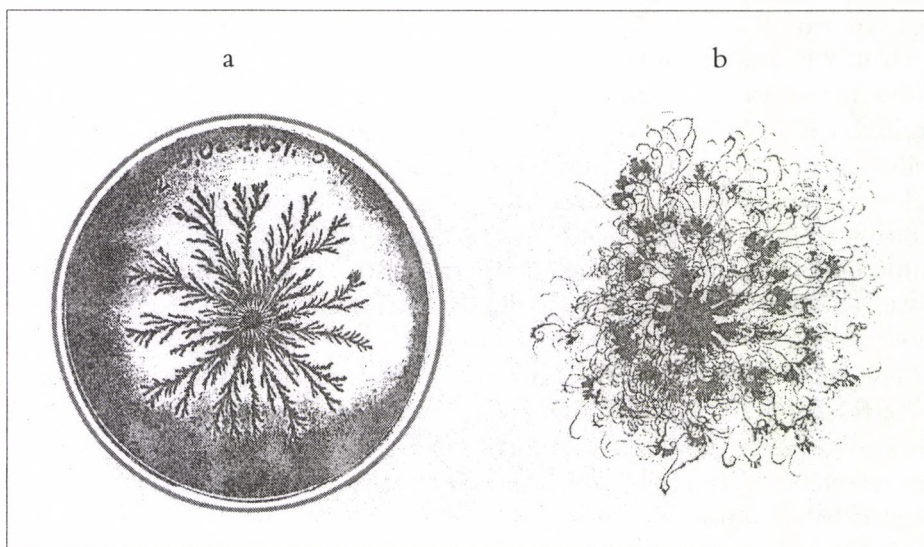
A tápanyagszegény feltételek között fejlődő baktériumtelepek egy része érdekes fraktál alakokat (például adott kiralitással rendelkező, „göndör” nyúlványokkal jellemezhető geometriával) mutatott [5].

### Modellek, értelmezés

A baktériumtelepek növesztése eredendően a komplexitás egy további fokozata az élettelen rendszerekhez képest, mivel az építő blokkok maguk is élő rendszerek, amelyek mindegyike saját autonóm (néha önző) önértékkel és belső szabadsági fokkal bír. A növekedési modellbe a következő általános jellemzőket építettük be: (1) a táplálék diffúziója; (2) a baktériumok mozgása; (3) szaporodás és elpusztulás; (4) lokális kommunikáció az ún. kemotaxis útján. A tápanyag diffúzióját egy háromszögű rácson  $c$  tápanyag-koncentráció mellett a

diffúziós egyenlet segítségével írtuk le. A baktériumokat bolyongó részecskék reprezentálták [4].

Minden bolyongó részecskét leír a helye ( $\vec{r}_i$ ) és belső szabadsági foka (belső energiája,  $W_i$ ), amely aktivitására hatással van. A bolyongó részecske  $e$  sebességgel veszíti el belső energiáját. Belső energiája növelésére rögzített  $c$ , sebességgel vesz fel tápanyagot, ha elegendő étel elérhető. Különben az elérhető mennyiséget veszi fel. Ha nincs elegendő táplálék egy idő-intervallumon belül (aminek következtében  $W_i$  nullára csökken), a bolyongó részecske mozdulatlanává válik (elpusztul). Ha elegendő az étel, akkor  $W_i$  nő, és amikor elér egy  $t_c$  küszöböt, a bolyongó részecske kettéválik (szaporodás).



4. ábra. a) Fraktál baktériumtelep. b) Ha a baktériumok nem tudnak mozgásuk közben szabadon elfordulni a mozgatószervük által kitüntetett meghatározott irányba, ilyen göndör, fraktál telepeket képeznek

A bolyongó részecskék rácson kívüli véletlen bolyongást végeznek egy jól definiálható kontúron belül. A kontúr minden egyes szegmense akkor mozdul el, ha  $N_c$ -szer beleütköztek a bolyongó részecskék. Ez a követelmény reprezentálja a lokális kommunikációt vagy a baktériumok együttes viselkedését.

Megjegyezzük, hogy az első közelítésben az  $N_c$ -szint az agar-koncentrációt jelenti, mivel a kontúr továbbmozdításához egy keményebb szubsztrátumon több ütközés szükséges.



### A modellegyenlet

$$\frac{\delta c(\vec{r}, t)}{\delta t} = D_c \nabla^2 c(\vec{r}, t) - \sum_{\text{aktív}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \min(c_r, c(\vec{r}, t)). \quad (3)$$

Ez a táplálékokra felírt diffúziós egyenlet ( $D_c$  a diffúziós állandó), amely a bolyongó részecskék táplálékfelvételét is tartalmazza (az utolsó tag).  $W_i$  időbeli változása

$$\frac{dW_i}{dt} = \min(c_r, c(\vec{r}_i, t)) - e. \quad (4)$$

Minden egyes időlépésben az aktív véletlen bolyongó részecskék  $d$  lépéshosszú  $[0, 2\pi]$  intervallumból egyenletesen választható  $\Theta$  szögű véletlen bolyongást végeznek. Így az új  $\vec{r}_i$  hely

$$\vec{r}_i' = \vec{r}_i + d(\cos \Theta, \sin \Theta). \quad (5)$$

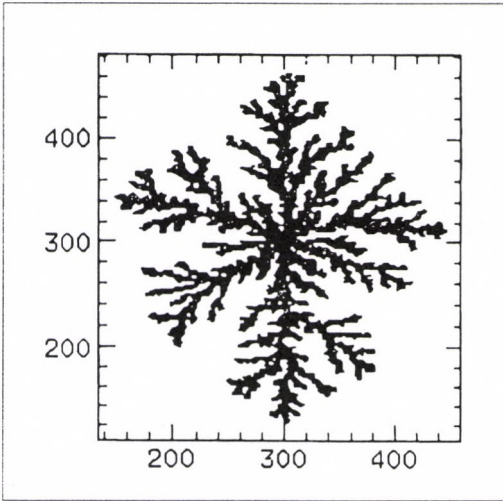
Ha az  $\vec{r}_i \rightarrow \vec{r}_i'$  metszi a kontúrt, akkor a lépést nem hajtjuk végre, és a kontúr megfelelő szegmensének számlálóját eggyel megnöveljük. Ha a számláló eléri az  $N_c$  értéket, a kontúrszegmens egy rácsegységgel áthelyeződik.

A jelenség komplexitása ellenére a fraktálstruktúra eredete jól értelmezhető: ha kevés a táplálék, hamar kifogy a telep határának közelében. Ekkor a telep kissé kidudorodó részei tápanyagban gazdagabb részbe érnek, és gyorsabban növekednek, mert itt a baktériumok gyorsabban szaporodnak. A dudor megnő, előrenyúló ágga válik, a hátramaradt részek az előlük elfogyasztott táplálék miatt nem nőnek tovább. Az előrenyúló ágon keletkezik egy újabb kis dudor, ez további elágazáshoz vezet, és az elágazások sokasága fraktálstruktúrát eredményez.

A numerikus szimulációk eredményeit a 5. ábra mutatja. A baktériumtelepek növekedéséhez hasonlóan a mintázatok tömörek magas tápanyag- (pepton-) szintnél, és fraktálok a csökkenő tápanyagszintre. Adott peptonszintre a mintázatok elágazóbbak, ahogy az agar-koncentráció (a zselé keménysége) nő.

Nyilvánvaló, hogy az 5. ábrán bemutatott eredmények nagyon biztatóak, és megragadják a megfigyelt mintázatok lényegét. Vannak azonban döntő minőségi különbségek is. Szükséges a kemotaxis figyelembevétele is.

Kemotaxison általában azt értik, hogy a mikroorganizmus mozgással reagál bizonyos vegyi anyagok koncentrációjának megváltozásakor. Szokás szerint a gradiens menti mozgás vagy a gradiens irányába vagy azzal ellenkező irányba



5. ábra. A baktériumtelepek növekedését számítógépes szimulációval is leírhatjuk. Az egyik numerikus kísérlet eredménye látható az ábrán

történik. Kemotaxikus választ létrehozhat egy külső kémiai mező vagy maguk a mikroorganizmusok, az utóbbit hívhatjuk kemotaxikus jelzésnek vagy kommunikációnak.

Bemutatjuk a kemotaxikus kommunikáció egyszerű modelljét. Minden lelassult (stacionárius) bolyongó részecske (vagy másképpen: azok a bolyongó részecskék, amelyek alacsony tápanyag-koncentrációnak vannak kitéve) rögzített  $s_r$  sebességgel kibocsát egy kommunikációs vegyi anyagot (hogyan megkísérrelje a többi baktériumot elűzni), és minden aktív bolyongó részecske  $c_c$  sebességgel

veszi fel ezt. Az alábbiakban megmutatjuk, hogy ez az egyszerű változtatás elegendő, hogy a növekedés minőségi lényegét megragadja. Egy realisztikusabb modellben ezek a sebességek a tápanyag és a kemotaxikus kommunikációs összetevők koncentrációjától függenének. A jelenlegi modellben a kommunikációs mező egyenlete:

$$\frac{\delta s(\vec{r}, t)}{\delta t} = D_s \nabla^2 s(\vec{r}, t) + \sum_{\text{stacioner}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) s_r - \sum_{\text{aktív}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \min(c_c, s(\vec{r}, t)). \quad (6)$$

Az aktív baktériumok mozgása változik a tisztán véletlen bolyongástól (egyenlő valószínűséggel minden irányban) a véletlen bolyongásig a kommunikációs mező gradiense mentén (magas valószínűségű a mozgás a jelző anyag irányában).

## Kollektív mozgás

Az élet egyik legjellemzőbb, legszembeszökőbb vonása a mozgás. Pontosabban az életet a mozgás speciális formái jellemzik, hiszen az élettelen anyag is örök mozgásban van. A biológiai mozgás sajátos jellegét az adja meg, hogy az



élő rendszerek *egyensúlytól távoli* állapotban vannak, és ebből eredően irányított folyamatok játszódnak le bennük. Egy magasabb szerveződési szintről tekintve, a biológiai mozgások sajátos funkciókkal rendelkeznek a faj fennmaradása szempontjából, vagy másképpen: olyan tulajdonságokat mutatnak, amelyek szelekciós előnyt jelentenek.

Gyakran a bonyolult geometria kialakulása éppen egy komplex kollektív mozgás eredménye.

Baktériumtelepekkel végzett kísérleteink azt mutatták, hogy a mikroorganizmusok mozgása adott feltételek mellett koordinálttá válik, és a baktériumok – a halakhoz vagy madarakhoz hasonlóan – csoportokban kezdenek mozogni. Ez leginkább akkor jelentkezett, amikor vonzó kemotaktikus kölcsönhatás jelenléte volt feltételezhető. Feladatunkul tűztük ki az ilyen csoportos, kollektív mozgás létrejöttének általános leírását a vonatkozó alapmodell megalkotása útján.

### *Kollektív viselkedés, szimmetriasértés, fázisátalakulás*

A sok egyforma objektumból („részecskékből”) álló rendszerek jellegzetes tulajdonsága, hogy valamilyen külső, fokozatosan változtatott paraméter  $t$  függvényében képesek viszonylag hirtelen megváltoztatni a tulajdonságaikat. Talán a legegyszerűbb, közismert példa a folyadékok megfagyása: a hőmérséklet fokozatos csökkentésekor a folyadék megfagy, szerkezete kristályossá válik, a molekulák kölcsönhatásának következtében egyszerre mintha mindegyik „tudná”, milyen szabályos struktúra szerint kell elhelyezkednie, egyik részecske sem bolyong tovább. Ez tipikus kollektív jelenség; a részecskék egyszerre, egymás hatására változtatják meg viselkedésüket.

Ha a hűtés lassú, és a hőmérsékleteloszlás a rendszerben homogén, egyensúlyi fázisátalakulásokat figyelhetünk meg. A természetben azonban tipikus, hogy az átalakulásokat kiváltó hatások erőssége gyorsan változik, és eloszlása sem egyenletes.

Akkor sincs egyensúlyban egy rendszer, ha bármilyen áramlás van jelen benne (pl. a hőmennyiség áramlása egyébként időben nem változó, két különböző hőmérsékletű pont között). Ilyenkor nem egyensúlyi átmeneteket lehet megfigyelni, amelyek a különbözőségek ellenére esetenként fontos közös vonásokat mutathatnak az egyensúlyi esettel. Mik ezek a lehetséges analógiák, amelyek a mélyebb megértést nagyban elősegíthetik? Mindkét típusú kollektív jelenség esetében fennáll, hogy egy külső paraméter változtatásakor annak egy adott  $t_c$  értékénél gyors változás történik a rendszer makroszkopikus viselkedését jellemző  $P$  mennyiségben. Ez a gyors változás lehet ugrásszerű vagy folyto-

nos, de az utóbbi esetben a változás hatványfüggvény formájában függ a paraméter aktuális és kritikus értékének különbségétől, tehát

$$P \sim |t - t_c|^\beta,$$

ahol  $\sim$  arányosságot jelöl.

Az átalakulások jellege gyakran nem függ a rendszerek részleteitől, így pl.  $\beta$  exponens értéke sok különböző fizikai rendszerre lehet egzaktul ugyanaz (univerzális), és ezért vált ezeknek az ún. kritikus exponenseknek a meghatározása a komplex rendszerek kutatásának egyik centrális feladatává.

### *Átmenet a rendezetlenből a rendezett mozgásba*

Ha azokat a jelenségeket kívánjuk megérteni, amelyek sok közel hasonló organizmus *kollektív mozgása* során figyelhetők meg, a statisztikus fizika területén felhalmozott tudásanyagot jól hasznosíthatjuk. Bizonyos feltételek mellett az organizmusok közötti, azok együttes mozgását domináló kölcsönhatás viszonylag egyszerű alakban is megfogalmazható; ezekben az esetekben az organizmusokat részecskéknak tekinthetjük, és a kölcsönhatást mint ütközési szabályt foghatjuk fel. A szimulációk során a megszokott algoritmusok használhatóak, azonban minőségileg új effektusokat várunk attól a figyelemre méltó különbségtől, hogy – nyílt rendszerek révén – az organizmusok kölcsönhatásakor *az impulzus és az energia nem marad meg*.

Ha a kollektív viselkedés kevésbé függ a részletektől, és valóban elsősorban a kölcsönhatás általános formája határozza meg, akkor azt várjuk, hogy nagyon *különböző organizmusok* is igen hasonló mozgásformákat mutathatnak. A fizikusok tipikusan az általános, univerzális összefüggések iránt érzékenyek, míg a gyakorlati (nem elméleti) biológiában az a szokásos, hogy a jelenségek specifikusságát hangsúlyozzák. Mi azt állítjuk, hogy modellünk egyaránt érvényes baktériumtelepekre, halrajokra, de még embercsoportok mozgására is.

Ezeknek a rendszereknek a legegyszerűbb modellje olyan részecskékből áll, amelyek egy síkon mozoghatnak, és *sebességük nagysága időben állandó*. Ez utóbbi feltétel azt veszi figyelembe, hogy a részecskék mindegyike „motorral” van ellátva, amely a disszipatív súrlódási erők ellenében dolgozik. Feltételezzük továbbá, hogy a részecskék igyekeznek *a helyi átlagsebességgel párhuzamosan* mozogni (az élőlények jellegzetes tulajdonsága, hogy mozgásukat koordinálják a közelükben lévő társaikkal, beleértve az embereket is), valamint a mozgásukat még egy véletlen fluktuáló erő is befolyásolja [6].

A modell viselkedését többek között Monte-Carlo-szimulációkkal térképezhetjük fel: A Monte-Carlo-módszer lényege, hogy egy sztochasztikus



egyenletrendszer vizsgálatokor numerikusan előállítjuk a kívánt statisztikának eleget tevő zajt, és – mintegy „mérést” végezve – meghatározzuk a keresett mennyiségeket.

Az egyszerűség kedvéért feltételezzük, hogy a részecskék mozgásirányának relaxációja gyors a rendszer konfigurációjának megváltozásához képest, azaz a következő, hatékonyan számítógépre vihető kifejezéseket iterálhatjuk:

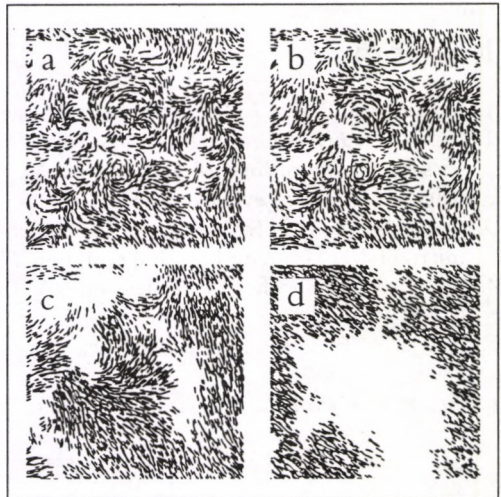
$$\vartheta_i(t + \Delta t) = \langle \vartheta(t) \rangle_i + \zeta_i, \quad (7)$$

$$\vec{x}_i(t + \Delta t) = \vec{x}_i(t) + v_0 \left( \frac{\cos \vartheta_i}{\sin \vartheta_i} \right) \Delta t, \quad (8)$$

ahol  $\vartheta$  és  $\langle \vartheta(t) \rangle_i$  az  $i$ -ik részecske mozgásirányát, helyzetét, valamint az egység-sugarú környezetének átlagos mozgásirányát jelöli. A  $\zeta_i$  egy Gauss-eloszlású fehér zaj  $\langle \zeta_i \zeta_{i'} \rangle = 2\eta^2 \delta_{i,i'} \Delta t$  autokorrelációs függvényvel, azaz a zaj erősségét  $\eta$  megválasztásával kontrollálhatjuk. Látható, hogy ezek az egyenletek  $\Delta t$ -től csak  $v_0 \Delta t$  formájában, illetve  $\eta$ -n keresztül függnek, így a továbbiak során feltételezhetjük, hogy  $\Delta t = 1$  és  $0 < v_0 \ll 1$ .

A modellben így összesen három kontrollparaméterünk maradt,  $\eta$ ,  $v_0$ , valamint a részecskék átlagsűrűsége  $\rho \equiv N/L^2$ , ahol  $N$  a részecskék száma,  $L$  pedig a rendszer lineáris mérete. Természetesen bennünket a – feltehetően univerzális – kollektív viselkedés érdekel, vagyis az  $N \rightarrow \infty$  „termodinamikai határesetet” vizsgáljuk, periodikus határfeltételekkel.

A 6. ábrán láthatjuk a modell tipikus viselkedését a kontrollparaméterek néhány értékére. Megfigyelhető, hogy nagy sűrűség és kis zaj mellett a rendszerben (önszervező módon, spontán szimmetriasértéssel) létrejön egy



6. ábra. Ez az ábra számítógépes szimuláció segítségével illusztrálja a mozgás összehangolódásának folyamatát. A kis szakaszok a pillanatnyi elmozdulás irányába mutatnak, és jól demonstrálják, hogy a kezdetben véletlenszerű, örvénylő mozgás hogyan alakul át kollektív koordinált helyváltoztatássá, valahogy úgy, ahogy egy madárcsapat rendeződik pillanatok alatt egy közös irányba repülő rajjá

a kölcsönhatási sugárnál lényegesen hosszabb távú rendeződés, amely az egész rendszeren átfolyó áramot hoz létre. Növelve a zajt vagy csökkentve a sűrűséget, ez a rendeződés eltűnik: kis sűrűségek esetén egymástól jórészt függetlenül mozgó „csapatokat” figyelhetünk meg, amelyek a zaj hatására sorra felbomlanak, illetve az „ütközések” során összeragadnak, nagyobb csapatokat létrehozva.

Két fontos eredményt kívánok itt kiemelni: 1.) a mozgás rendeződése fázisátalakulás-szerű, az összes részecskére számított átlagos sebesség a zaj csökkentésekor nulláról hatványfüggvény szerint ( $\beta \approx 0,4$ ) nő meg egy adott, véletlenszerűen szelektálódott irányba (szimmetriasértés). 2.) Ha kör alakú cellába kényszerítjük a részecskéket, elkezdenek körözni, ez a mozgás spontán alakul ki, hasonlóan ahhoz, ahogy egy kör alakú akváriumban néha együtt köröznek a halak, de megfigyeltük és értelmeztük ezt a viselkedést baktériumok esetében is. A Kába-kő körül Mekkában több tízezer ember mozog közel körpályán; ha az Olvasó belegondol, ez a jelenség szintén értelmezhető a modellünkkel.

## Irodalom

1. Mandelbrot, B. B.: *The Fractal Geometry of Nature*. Freeman, San Francisco, 1982.
2. Vicsek, T.: *Fractal Growth Phenomena*. World Scientific, New-Jersey – Singapore, 1992.; Vicsek, T., Matsushita, M., Shlesinger, M. (szerk.): *Fractals in Natural Sciences*. World Scientific, New-Jersey–Singapore, 1994.
3. Czirók, A., Somfai, E., Vicsek, T.: Experimental evidence for self-affine roughening in a micromodel of geomorphological evolution. *Phys. Rev. Lett.*, 71 (1993) 2154.
4. Ben-Jacob, E., Shochet, O., Tenenbaum, A., Cohen, I., Czirok, A., Vicsek, T.: *Nature*, 368 (1994) 46.
5. Ben-Jacob, E., Cohen, I., Shochet, O., Czirók, A., Vicsek, T.: *Phys. Rev. Lett.*, 75 (1995) 2899.
6. Vicsek, T., Czirók, A., Ben-Jacob, E., Cohen, I., Shochet, O.: *Phys. Rev. Lett.*, 75 (1995) 1226.



## AZ MTA ÉVKÖNYVE

Megindul az MTA Évkönyve, mely az év legfontosabb akadémiai történéseinek dokumentumait tartalmazza.

A tartalomból:

1) Közgyűlés

Elnöki beszámoló  
Főtitkári beszámoló  
Országgyűlési jelentés, 1998 (részlet)  
Kormánybeszámoló  
Határozatok

2) Vezető szervek

Elnökség  
Vezetői Kollégium

3) Szervezet

Területi bizottságok  
Az MTA tudományos osztályai  
Doktori Tanács  
Akadémiai Kutatóhelyek Tanácsa  
Akadémiai Kutatóhelyek Vezetőinek Tanácsa  
Intézetek, támogatott kutatócsoportok  
Az MTA Könyvtára  
Akadémiai Klub Egyesület

4) Kiemelt programok

A Magyar Tudomány Napja  
Intézetkonszolidáció  
Stratégiai kutatások  
Tudománypolitika  
Bolyai János Kutatási Ösztöndíj  
Határon túli magyar tudományosság

5) Személyi hírek

Az MTA új tagjai  
Halottaink  
Kitüntetettek

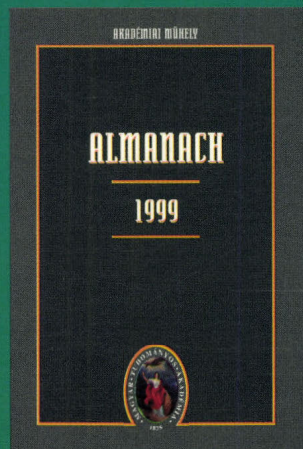
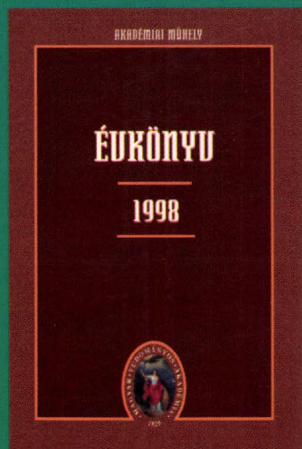
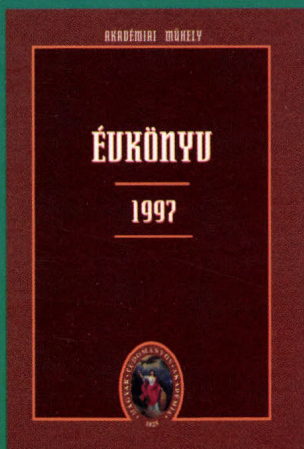
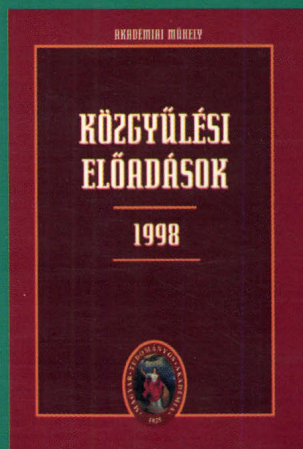
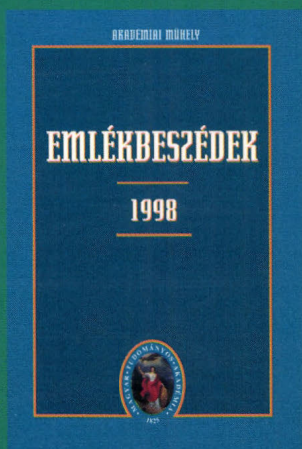
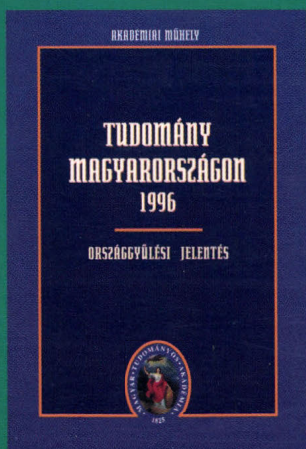






# AKADÉMIAI MŰHELY

1997-ben az Akadémia vezetése úgy döntött, hogy könyvsorozatot indít „Akadémiai Műhely” címmel, amelynek feladata, hogy segítse Akadémiánk működésének rendszerességét, és egyben szervezze is az akadémiai fórumokat. El akarjuk érni, hogy az akadémiai székfoglalókat írásban is készítsék el tagtársaink, ezért jelentetjük meg azokat 1998-tól rendszeresen (*Székfoglalók a Magyar Tudományos Akadémián*). Erősíteni akarjuk a tudótestület tradícióit mint bennünket összetartó erőt és a tudományban a folyamatosság fontosságára figyelmeztető tényezőt. Ezért újítottuk fel az 1949-ben megszakadt emlékbeszédek hagyományát az Akadémia elhunyt tagjairól. Gondoskodni kívánunk ezek kiadásáról (*Emlékbeszédek az MTA elhunyt tagjai felett*). Közreadjuk ezután a közgyűlések alkalmából elhangzott tudományos előadások szövegét (*Közgyűlési előadások*). És ezek mellett megindítjuk az Akadémia történelmében valahogy mindig elmaradt évkönyvsorozatot (*Az MTA Évkönyve*), és rendszeresen megjelentetjük az 1991-ben megszakadt, majd 1997-ben újraindított akadémiai almanachsorozatot (*Az MTA Almanachja*).



9 789635 081462

I-II. kötet: 1600 Ft